



Тверской  
государственный  
университет



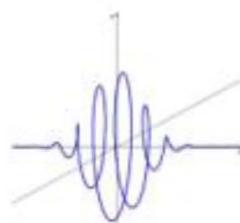
## **XXVII КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ**

**Всероссийская научно-техническая  
конференция молодых учёных**

**«Физика, химия и новые технологии»,  
посвященная Году  
науки и технологий**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ**

**Тверь, 2021**



Министерство науки и высшего образования  
Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Тверской государственный университет»

## **XXVII КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ**

**ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ  
КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЁНЫХ**

*«Физика, химия и новые технологии»,*

**ПОСВЯЩЕННАЯ ГОДУ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ**

1-2 апреля 2021 года г. Тверь

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

ТВЕРЬ 2021

УДК 54(082)  
ББК Г.я431  
К21

**Ответственные за выпуск:**

доктор химических наук П.М. Пахомов  
кандидат химических наук Н.П. Русакова

**К21 XXVII Каргинские чтения: тезисы докладов.** Всероссийская научно-техническая конференция молодых учёных «Физика, химия и новые технологии», посвященная Году науки и технологий 1-2 апреля 2021 г. / – Тверь: Тверской государственный университет, 2021. – 180 с.

ISBN 978-5-7609-1633-4

Всероссийская научно-техническая конференция молодых учёных в рамках Каргинских чтений проводится ежегодно, начиная с 1999 г. В сборнике представлены доклады студентов, аспирантов, молодых учёных тверских вузов, а также вузов других городов. Рассмотрены современные проблемы физики, химии и новых технологий.

УДК 54(082)  
ББК Г.я431

ISBN 978-5-7609-1633-4

© Авторы статей, 2021

© Тверской государственный университет, 2021

## Оглавление

1. ....	<i>Абусуек Д.А., Никошвили Л.Ж.</i> Влияние типа цеолита на активность Ru-содержащих катализаторов в реакции гидрирования левулиновой кислоты .....	15
2. ....	<i>Авлякулова Г, Шилова О.В.</i> Влияние боратного комплекса на продуктивность свеклы столовой .....	16
3. ....	<i>Адамян А.Н., Пахомов П.М., Хижняк С.Д.</i> Процессы самоорганизации в системах на основе L-цистеина, солей серебра и полигуанидина .....	17
4. ....	<i>Азизов Г.Н., Велюханов И.В.</i> Влияние подкормки на продуктивность овса .....	18
5. ....	<i>Али М., Малышкина О.В.</i> Температурные зависимости диэлектрической проницаемости керамик ниобата натрия с разным режимом синтеза .....	19
6. ....	<i>Антонова В.С., Осовская И.И.</i> Влияние ферментативного гидролиза на получение распушенной целлюлозы для гигиенических изделий разового пользования .....	20
7. ....	<i>Афонькин Н.С., Хижняк С.Д.</i> Синтез наночастиц серебра с помощью водных экстрактов листьев крапивы двудомной .....	21
8. ....	<i>Ахметшина Е.С., Хурсан С.Л.</i> Гомодесмотический метод разделения и количественного учета невалентных эффектов различной природы .....	22
9. ....	<i>Бабуркин П.О., Комаров П.В.</i> Управление морфологией фотоактивного слоя полимерного нанокомпозита на основе сопряженных полимеров и квантовых точек .....	23
10. ....	<i>Баданина П.А., Усовик Е.Р.</i> Изучение свойств БАД-парафармацевтиков на основе лекарственных трав .....	24
11. ....	<i>Базулева В.А., Прутенская Е.А.</i> Исследование влияния методов очистки на размеры белковых частиц .....	25
12. ....	<i>Байкова А.А., Ляхова М.Б.</i> Анализ методов определения энергии доменных границ одноосных ферромагнетиков .....	26
13. ....	<i>Балакшина Д.В., Гребенникова О.В.</i> Каскадные реакции с использованием мультиферментных систем .....	27
14. ....	<i>Баранник А.А., Хижняк С.Д.</i> Формирование супрамолекулярных гидрогелей под влиянием иодид-иона в L-цистеин-AgNO <sub>3</sub> системах .....	28

15. .... Барсегян Т.А., Пахомов П.М., Адамян А.Н.  
Влияние хлоргексидина на процесс самоорганизации  
в цистеин-серебряном растворе ..... 29
16. .... Бахвалова Е.С., Сульман М.Г., Никошвили Л.Ж.  
Влияние типа реактора на протекание реакции Сузуки  
в присутствии полимерного биметаллического катализатора ..... 30
17. .... Беззубов А.Н., Голованова О.А.  
Исследование процессов коррозии стали СТЗ в водной  
среде и подбор ингибиторов ..... 31
18. .... Белявский М.А., Кузнецова Ю.В.  
Применение продукта Web-сервис ParticlesNN для анализа  
изображений микроструктуры соединений  $GdCo_4Cu$  ..... 32
19. .... Бертова А.В., Никошвили Л.Ж.  
Влияние степени сшивки полистирола на свойства палладиевых  
полимерных катализаторов гидрирования ..... 33
20. .... Беспалов Д.В., Голованова О.А.  
Синтез комплексных соединений ионов кальция (II) с аминокислотами ..... 34
21. .... Бондарь А.А., Лагусева Е.И.  
Влияние строения термореактивного связующего  
на химическую стойкость стеклопластика ..... 35
22. .... Бородина А.М., Осовская И.И.  
Изучение влияния рН среды на вязкость растворов ксантановой камеди ..... 36
23. .... Братасюк Н.А., Зув В.В.  
Синтез и свойства эпоксиуретановых нанокомпозитов,  
содержащих гексагональный нитрид бора ..... 37
24. .... Брянцев Д.В., Виноградова М.Г.  
Топологические индексы в исследовании корреляций  
«структура-свойство» альдегидов ..... 38
25. .... Буренина А.Ю., Веролайн Н.В.  
Изучение свойств органических фосфатов в качестве  
огнезащитных добавок ..... 39
26. .... Васильев А.Д., Иванова А.И.  
Микроструктура сплавов Гейслера ..... 40
27. .... Васильева А.П., Осовская И.И.  
Гидрофобизация гуаровой камеди ..... 41
28. .... Ватаманюк В.О., Пахомов П. М., Маркова А.И.  
Определение размера твердых частиц наполнителя  
в суспензиях методом спектроскопии ..... 42
29. .... Веролайн В.А., Темникова С.А.  
Получение эмульсий оливкового масла в растворах  
неионогенных поверхностно-активных веществ ..... 43

30. .... *Веселов А.Д., Сдобняков Н.Ю.*  
Об условиях стабильности/нестабильности биметаллических наноструктур ядро-оболочка ..... 44
31. .... *Веселова А.В., Веролайн Н.В.*  
Синтез октил- и децилполигликозидов ферментативным методом ..... 45
32. .... *Войташ А.А., Муратов А.В., Ересько А.Б.*  
Молекулярное моделирование 2-метил-2,3,4,5-тетрагидро-1Н-[1]бензотиено[2,3-с]азепина ..... 46
33. .... *Волкова В.М., Хижняк С.Д.*  
Оценка эффекта антропогенных факторов на химический состав листьев клёна ..... 47
34. .... *Волчкова Е.С., Никольский В.М.*  
Синтез и свойства L-изомера N-(карбоксиметил)аспарагиновой кислоты ..... 48
35. .... *Галайко А.С., Барабанова Е.В., Сероштанов О.Л.*  
Влияние легирования барием на диэлектрические свойства керамики KNN ..... 49
36. .... *Гамрекели Ю.А., Никольский В.М.*  
Анализ содержания никотиновой кислоты в сыворотке для лица и концентрате для волос ..... 50
37. .... *Гешко В.В., Хижняк С.Д.*  
Зеленый синтез наночастиц серебра с помощью водных экстрактов дуба ..... 51
38. .... *Головачев А.А., Черкасова Е.В.*  
Получение концентратов металлов при переработке угольных отходов Кузбасса ..... 52
39. .... *Горбачев С.А., Зуев В.В.*  
Синтез и фазовое поведение жидкокристаллических димеров на основе оксиалкил- и цианобифенилов ..... 53
40. .... *Давлатов И.У., Павлов М.Н.*  
Влияние некорневых подкормок комплексными удобрениями на продуктивность сортов картофеля в условиях Верхневолжья ..... 54
41. .... *Демченко С.Д., С.Д. Хижняк*  
Влияние промышленных загрязнений на синтез наночастиц серебра в водных экстрактах рябины обыкновенной ..... 55
42. .... *Деревцова Е.В., Иванова А.И.*  
Методы исследования доменной структуры сплавов Гейслера ..... 56
43. .... *Десяцкова А.М., Конюхов В.Ю.*  
Термодинамика набухания флексоформ фирмы JET в низкомолекулярных растворителях ..... 57
44. .... *Дмитриева М.Ю., Шилова О.В.*  
Эффективность применения боросодержащих соединений на моркови ..... 58

45. .... Долгов Г.Д., Берестова Т.В.  
DFT-моделирование процесса S-тиолирования L-цистеина  
в присутствии серосодержащих ионов ..... 59
46. .... Дорошенко И.Д., Хижняк С.Д.  
Синтез наночастиц серебра с помощью экстрактов мать-и-мачехи ..... 60
47. .... Дунаева Г.Г., Карпенков А.Ю.  
Исследование динамики доменной структуры на поверхности  
монокристалла  $\text{SmCo}_5$ ..... 61
48. .... Еремченкова Н.Э., Никошвили Л.Ж., Быков А.В.  
Получение и свойства шитых полимеров ..... 62
49. .... Жигунов Д.В., Ретин А.А.  
Реализация алгоритма по контролю целостности данных  
и исправлению ошибок на ПЛИС..... 63
50. .... Жохов И.С., Лагушева Е.И.  
Влияние концентрации ацилируемых мономеров в процессе синтеза  
полиамидов ПТ и бПТ..... 64
51. .... Завилейская В.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В.  
Сравнение электронных свойств D- и L- конформеров цистеина ..... 65
52. .... Зайцева Л.А., Прутенская Е.А.  
Получение меланина из продуктов жизнедеятельности насекомых ..... 66
53. .... Закотяжкин Н.А., Михеева Л.В., Дубинина Н.В.  
Физико-химические свойства кофе ..... 67
54. .... Зеников Г.Р., Хижняк С.Д.  
Супрамолекулярные гидрогели на основе аминокислоты  
L-цистеин, нитрата серебра и хитозана ..... 68
55. .... Зиганшин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В.  
QTAIM анализ 15-краун-5 и 1,4,7,10,13-пентатио-15-краун-5 ..... 69
56. .... Зуева А.С., Баранова Н.В.  
Физико-химический анализ аспирина разных производителей ..... 70
57. .... Иванов В.В., Кислова И.Л.  
Температурные зависимости диэлектрических характеристик  
пленок  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$  ..... 71
58. .... Каленова Н.С., Темникова С.А.  
Влияние природы радикала на свойства алкилсульфосукцинатов ..... 72
59. .... Калюжная Л.А., Виноградова М.Г.  
Корреляции «структура – энергия гиббса» тиоспиртов.  
Топологический подход ..... 73
60. .... Караулова Д.А., Алексеев В.Г.  
Исследование комплексообразования этилендиамин-N,N-дипропионовой  
кислоты с двухвалентными катионами d-элементов ..... 74

61. ....	<i>Кафтанов А.Д., Егорова И.Ю.</i> Металлокомплексы меди с производными азогидразонов .....	75
62. ....	<i>Ковальчук К.М., Веролайн Н.В.</i> Влияние неионогенных ПАВ на седиментационную устойчивость суспензии ментола .....	76
63. ....	<i>Козлова Р.Р., Виноградова М.Г.</i> Теория графов в исследовании корреляций «структура – энтальпия образования» гликолей .....	77
64. ....	<i>Кокорин С.А., Луцик В.И.</i> Кинетика растворения латуни в сернокислой среде .....	78
65. ....	<i>Коробов М.А., Моталов В.Б., Дунаев А.М.</i> Исследование термодинамики сублимации DL-метионина методом высокотемпературной масс-спектрометрии .....	79
66. ....	<i>Коршакова А.А., Никошвили Л.Ж.</i> Селективное гидрирование фенилацетилена до стирола в присутствии полимерного палладиевого катализатора .....	80
67. ....	<i>Косивцов Г.Ю., В.П. Молчанов</i> Переработка трёхмерных биополимеров с использованием субкритических флюидов .....	81
68. ....	<i>Костромина А.А., Ворончихина Л.И.</i> Получение производных пиперидина и морфолина по реакции Манниха .....	82
69. ....	<i>Котомкин А.В., Орлов Ю.Д., Туровцев В.В.</i> Энтальпия образования радикалов фторалканов .....	83
70. ....	<i>Кравченко В.В., Савоськин М.В., Алемасова Н.В.</i> Управление пористой структурой активированного водяным паром антрацита .....	84
71. ....	<i>Краснякова И.О., Рудская А.Г.</i> Оценка количества примесных фаз в $BiFeO_3$ .....	85
72. ....	<i>Крылов А.А., Алексеев В.Г.</i> Потенциометрический сенсор с непосредственным отсчетом на основе поли-1-нафтиламина .....	86
73. ....	<i>Крюков Т.В., Феофанова М.А.</i> Исследование твердых комплексов гадолиния и тербия с цефазолином методом ИК-спектроскопии .....	87
74. ....	<i>Кудряшова Е.А., Егорова И.Ю.</i> Получение азогидразонов на основе пропандиовой кислоты .....	88
75. ....	<i>Куров А.Г., Макаров В.В.</i> Разработка модуля удаленного управления на SIM800C .....	89
76. ....	<i>Куручкин Г.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В.</i> Электронные свойства димеров пиррола .....	90

77. .... *Лапшина Н.А., Ворончихина Л.И.*  
Синтез четвертичных солей трифенилфосфония ..... 91
78. .... *Ларионова О., Феофанова М. А.*  
Коррозионное воздействие дифенильной смеси на металлические  
конструкционные материалы: медь, припой, латунь, сталь,  
чугун, алюминий ..... 92
79. .... *Лебедева И.Е., Ожимкова Е.В.*  
Компостирование отходов переработки льна ..... 93
80. .... *Левчукова В.А., Вишневецкий Д.В., Андрианова Я.В.*  
Макропористые криогели и пленки на основе  
L-цистеин/AgNO<sub>3</sub>/ПВС супрамолекулярной системы ..... 94
81. .... *Легочева Е.С., Тихомирова А.В.*  
Магнитная сепарация золошлаковых отходов  
с выделением ценных компонентов ..... 95
82. .... *Леончук С.С., Голованова О.А.*  
Влияние лецитина на фазовый состав карбоната кальция в желчи ..... 96
83. .... *Лимонова Н.Н., Хижняк С.Д.*  
Процессы самосборки в низкоконтрированных  
растворах на основе глицина ..... 97
84. .... *Лусина О.В., Берестова Т.В.*  
Исследование продуктов окисления  
L-цистеина методом ЯМР-спектроскопии ..... 98
85. .... *Луцай А.В., Репин А. А.*  
Алгоритм компьютерного зрения и физическая модель для повышения  
точности и надёжности отслеживания перемещений на станках с ЧПУ ..... 99
86. .... *Макарова Е.А., Минина М.В.*  
Количественное определение Fe<sup>2+</sup> и Ni<sup>2+</sup> при совместном присутствии ..... 100
87. .... *Мальшев М.Д., Комаров П.В.*  
Теоретическая модель структурообразования  
цистеин-серебряного раствора ..... 101
88. .... *Мальшев М.Д., Комаров П.В.*  
Моделирование смесей РВТТТ/РС61ВМ: диссипативная динамика частиц .. 102
89. .... *Мамаев П.В., Белоцерковец Н.И.*  
Изучение поверхностно активных веществ с помощью  
метода кондуктометрии ..... 103
90. .... *Маркова М.Е., Степачева А.А.*  
Гидротермальный синтез металлсодержащих катализаторов  
на полимерном носителе ..... 104
91. .... *Маркова А.И., Пахомов П.М., Хижняк С.Д.*  
Спектроскопический метод оценки качества вазелинового масла  
при гель-формовании СВМПЭ ..... 105

92. ....	<i>Матус Я.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В.</i> Сравнение электронного строения глутамина и глутаминовой кислоты .....	106
93. ....	<i>Мелиева Ш.Б., Егорова И.Ю.</i> Получение триарилформазапов на основе сульфопо- и аминобензойных кислот .....	107
94. ....	<i>Мельникова Е.В., Михеева Л.В., Дубинина Н.В.</i> Пищевые красители: натуральные или синтетические? .....	108
95. ....	<i>Механников И.А., Хижняк С.Д.</i> Процессы самосборки в <i>L</i> -цистеин-нитрат серебра супрамолекулярных системах, инициированные фторид анионом .....	109
96. ....	<i>Мигулев С.П., Усанова З.И.</i> Влияние некорневых подкормок регуляторами роста и удобрениями на продуктивность сортов картофеля в условиях Верхневолжья .....	110
97. ....	<i>Михайлов С.П., Сульман М.Г.</i> Термодинамические характеристики реакции восстановительного аминирования .....	111
98. ....	<i>Михайлова Е.М., Прутенская Е.А.</i> Биотехнологические аспекты получения посадочного материала хвойных культур .....	112
99. ....	<i>Михайлова П.Д., Ожимкова Е.В.</i> Створки бобовых культур – перспективное вторичное сырье для получения антиоксидантов .....	113
100. ..	<i>Михеев А.В., Никошвили Л.Ж.</i> Жидкофазное гидрирование фенола на полимерном палладиевом катализаторе .....	114
101. ..	<i>Мовсесян Н.С., Соболев А.Е.</i> Сравнительный анализ современных методов определения ионов трехвалентного железа в водных растворах .....	115
102. ..	<i>Момзякова К.С., Дебердеев Р.Я.</i> Оценка зависимости свойств травянистой целлюлозы от условий её отбелки	116
103. ..	<i>Монжаренко М.А., Степачёва А.А.</i> Кинетическое исследование получения жирных спиртов методом гидрирования жирных кислот .....	117
104. ..	<i>Мосолова Д.И., Вишневецкий Д.В., Андрианова Я.В.</i> Исследование взаимодействия низкомолекулярной ДНК с <i>L</i> -цистеин/ AgNO <sub>3</sub> супрамолекулярной системой .....	118
105. ..	<i>Муравьева А.Ю., Степачёва А.А.</i> Получение биосорбентов на основе иммобилизованных дрожжей .....	119
106. ..	<i>Мурсалов Р.К., Кулатина Е.Г.</i> Планарные сенсоры для определения амоксициллина в фармацевтических препаратах .....	120

107. .. *Навров А.В., Шилова О.В.*  
Влияние селеносодержащих соединений  
на продуктивность разных сортов картофеля ..... 121
108. .. *Небывалова К.К., В.М. Самсонов*  
Прогнозирование стабильности/нестабильности наноструктур  
ядро-оболочка с использованием метода Брэгга-Вильямса ..... 122
109. .. *Нефедова И.А., Русакова Н.П., Туровцев В.В.*  
Электронное строение декансульфона ..... 123
110. .. *Нехаева З.О., Молчанов В.П.*  
Решение проблемы утилизации сточных вод животноводческих  
комплексов методом биокаталитической очистки ..... 124
111. .. *Низаметдинова Л.А., Мустафин А.Г., Берестова Т.В.*  
Исследование S-тиолирования L-цистеина методом  
ИК спектроскопии МНПВО ..... 125
112. .. *Никитенко Д.В., Краснякова Т.В., Митченко С.А.*  
DFT-оценка величины константы равновесия окислительного  
присоединения MeI к  $PtCl_4^{2-}$  в растворе ацетона ..... 126
113. .. *Новоженин Д.Ю., Адамян А.Н., Пахомов П.М.*  
Влияние карбоксиметилцеллюлозы на процесс самоорганизации  
в цистеин-серебряном растворе ..... 127
114. .. *Околота Д.А., Темникова С.А.*  
Димерные поверхностно-активные вещества на основе  
многоосновных кислот ..... 128
115. .. *Останин С.А., Зуев В.В.*  
Микрофазная структура полиуретанов, исследованная методом  
релаксационной твердотельной спектроскопии ЯМР ..... 129
116. .. *Папулова А.С., Бордина Г.Е., Мсхвильдзе Н.П.*  
Фотодинамическая терапия. Фотосенсибилизаторы,  
их применение в стоматологии ..... 130
117. .. *Петров Р.А., Малышкин А.В.*  
Разработка программного комплекса для измерения влажности льнотресты .131
118. .. *Петров В.Р., Вишневецкий Д.В., Аверкин Д.В.*  
Саморганизация в низкоконцентрированных водных растворах на основе  
L-цистеина, N-ацетил-цистеина и ацетата серебра с молибдатом натрия ..... 132
119. .. *Платонов И.А., Шилова О.В.*  
Влияние боросодержащих микроудобрений на урожайность  
сортов картофеля ..... 133
120. .. *Пономарчук Е.Е., Никошвили Л.Ж.*  
Исследование факторов, влияющих на скорость протекания реакции  
Сузуки в присутствии биметаллических катализаторов ..... 134

121. .. *Прошкин Д.Д., Тихомирова А.В.*  
Использование низкопотенциального тепла в аммиачном производстве ..... 135
122. .. *Прокофьева С.Д., Вишневецкий Д.В., Адамян А.Н.*  
Особенности процесса гелеобразования в системе на основе  
L-цистеина, нитрата серебра и карбоксиметилцеллюлозы ..... 136
123. .. *Просьяник Ю.А., Веролайн Н.В.*  
Исследование пенообразующих свойств смесей  
синтанолов и полиэтиленгликоля ..... 137
124. .. *Радин А.С., Феофанова М.А.*  
Химические газовые сенсоры на основе пленки из наноцеллюлозы  
модифицированной фосфорновольфрамовой  
гетерополикислотой типа Доусона ..... 138
125. .. *Расказова Н.Ю., Журавлёв О.Е.*  
Электропроводность растворов ионных жидкостей на основе  
четвертичных солей N-алкилпиридиния ..... 139
126. .. *Ребрищева Н.А., Гребенникова О.В.*  
Синтез магнитных биокатализаторов на основе  
иммобилизованной пероксидазы корня хрена ..... 140
127. .. *Рогатко М.И., Хилько С.Л.*  
Реологические характеристики растворов этоксилированных  
гуминовых кислот на границе раздела жидкость-газ ..... 141
128. .. *Рудь Д.В., Степачёва А.А.*  
Деоксигенирование жирных кислот в сверхкритических условиях ..... 142
129. .. *Русаков М.В., Хижняк С. Д.*  
Синтез наночастиц серебра с помощью экстрактов листьев берёзы повислой ..... 143
130. .. *Савина О.Д., Смирнова Т.И., Шилова О.В.*  
Спектрофотометрическое определение антоцианов в плодах  
ягодных растений ..... 144
131. .. *Савина О.Д., Смирнова Т.И., Шилова О.В.*  
Селеносодержащее ультрамикродобрение ..... 145
132. .. *Сальникова К.Е., Матвеева В.Г., Молчанов В.П.*  
Исследование Ru/полимерного катализатора при гидрировании  
фурфурола до фурфурилового спирта ..... 146
133. .. *Свешников П.А., Иванова А.И.*  
Анизотропия прочностных свойств монокристаллов германия ..... 147
134. .. *Симанова А.Ю., Степачёва А.А.*  
Гидрирование лауриновой кислоты ..... 148
135. .. *Скачкова Д.М., Веролайн Н.В.*  
Исследование коллоидно-химических свойств смесей анионных  
поверхностно-активных веществ с алкилполиглюкозидами ..... 149

136. .. Скобин М.И., Феофанова М.А.  
Исследование типового комплексного соединения лантаноида с гепарином в растворе и твердом виде ..... 150
137. .. Собирова Ш.А., Шилова О.В.  
Формирование урожайности капусты белокочанной при использовании медьсодержащих соединений ..... 151
138. .. Соколова Ю.А., Конюхов В.Ю.  
Термодинамика и кинетика набухания фотополимеров фирмы JET в низкомолекулярных жидкостях ..... 152
139. .. Соловьев И.Н., Прутенская Е.А.  
Изучение влияния меланиновых препаратов на жизнеспособность посевного материала ..... 153
140. .. Стажок Т.Л., Веролайн Н.В.  
Получение и исследование свойств амфотерных поверхностно-активных веществ ..... 154
141. .. Стычинский Д.М., Хижняк С.Д.  
Изучение влияния антропогенных факторов на образование наночастиц серебра в экстрактах хвои ели европейской ..... 155
142. .. Суратова Е.С., Журавлев О.Е.  
Синтез ионных жидкостей на основе четвертичных солей N-алкилпиридиния с неорганическими анионами ..... 156
143. .. Суханова А.А., Луцик В.И.  
Исследование растворения кальцита в кислой среде ..... 157
144. .. Сухов П.В., Ракша Е.В., Савоськин М.В.  
Углеродные наночастицы на основе соединения соинтеркалирования нитрата графита с муравьиной кислотой ..... 158
145. .. Сушнев С.П., Бордина Г.Е., Лопина Н.П.  
Поверхностно-активные вещества – польза или вред? ..... 159
146. .. Тимофеева Е.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В.  
Монозамещенные бензола в рамках квантовой теории атомов в молекулах ..... 160
147. .. Туманов Г.А., Лакина Н.В.  
Вольтамперометрические характеристики нанесенных на электроды окислительно-восстановительных ферментов ..... 161
148. .. Тупикина Е.П., Л.Ж. Никошвили  
Влияние выбора растворителя на протекание реакции Соногашира, катализируемой палладием ..... 162
149. .. Феногенова В.В., Солнышкин А.В., Сергеева О.Н.  
Дисперсия диэлектрических характеристик монокристаллических структур нитрид алюминия/нитрид алюминия галлия ..... 163

150. .. *Фомина Ю.С., Конюхов В.Ю.*  
Адсорбционные свойства пигментов цветной печати ..... 164
151. .. *Ханмамедов Г.С., Шилова О.В.*  
Применение агрогумата калия при возделывании картофеля .....165
152. .. *Хлопкин А.Е., Большакова Н.Н.*  
Гистерезисные явления в калий- и натрийсодержащих кристаллах  
триглицинсульфата ..... 166
153. .. *Цветкова В.А., Вишневецкий Д.В., Потапенкова Т.В.*  
Особенности самоорганизации в системах *L*-цистеин/ $\text{AgNO}_2$   
и *N*-ацетил-*L*-цистеин/ $\text{AgNO}_2$  .....167
154. .. *Челидзе Е.Ш., Журавлев О.Е.*  
Синтез ионных жидкостей на основе 2-(диметиламино)  
этанола с неорганическими анионами ..... 168
155. .. *Чердакова Е.Н., Кулапина Е.Г.*  
Применение планарных потенциометрических сенсоров для определения  
цефуроксима в лекарственных препаратах различных производителей ..... 169
156. .. *Шарапова М.Д., Никошвили Л.Ж.*  
Гидрирование нитробензола в мягких условиях  
с использованием катализатора Pd/MN100 ..... 170
157. .. *Шачнева К.С., Баранова Н.В.*  
Обратное цериметрическое определение *p*-ацетаминофена  
в лекарственных средствах ..... 171
158. .. *Шекина К.Д., Журавлёв О.Е.*  
Изучение электропроводности растворов ионных жидкостей на основе  
четвертичных солей *N*-алкил-2-метилпиридина ..... 172
159. .. *Шишков Г.С., Малышкина О.В.*  
Зависимость диэлектрических свойств керамики титаната бария и  
композита титанат бария – феррит бария от температуры спекания ..... 173
160. .. *Шжерина К.Н., Никошвили Л.Ж.*  
Влияние природы арилгалогенида на протекание реакции Сузуки  
в присутствии катализатора Pd/MN100 ..... 174
161. .. *Шустова О.А., Солнышкин А.В., Сергеева О.Н.*  
Пироэлектрические свойства композитных слоистых материалов  
на основе монокристаллических пластин AlN/AlGaN ..... 175
162. .. *Шухина К.А., Хижняк С.Д., Пахомов П.М.*  
Исследование влияния нитрата серебра на процессы самоорганизации  
низкоконцентрированных систем глицина и поливинилового спирта ..... 176
163. .. *Щеглова А.И., Кислова И.Л.*  
Влияние примеси La на диэлектрические свойства  
релаксора  $(\text{Pb}_x\text{La}_{1-x})(\text{Zr}_y\text{Ti}_{1-y})\text{O}_3$ ..... 177

164. ..Щенухина А.С., Русакова Н.П., Туровцев В.В.

QТАІМ характеристики слабых взаимодействий

метилового красного ..... 178

165. ...Якубенко К.В., Степачёва А.А.

Гидродесульфирование дибензотиофена ..... 179

УДК: 544.473-039.63

Абусуек Диаля Атия

**ВЛИЯНИЕ ТИПА ЦЕОЛИТА  
НА АКТИВНОСТЬ Ru-СОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ  
В РЕАКЦИИ ГИДРИРОВАНИЯ ЛЕВУЛИНОВОЙ КИСЛОТЫ**

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

Тверской государственный технический университет, г. Тверь  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Сокращение запасов ископаемых ресурсов и растущий спрос на нефтяное топливо стимулирует разработку эффективных каталитических методов преобразования целлюлозной биомассы в топливные добавки и химические соединения. Лигноцеллюлозное сырье может быть преобразовано в платформенные химические вещества такие, как 5-гидроксиметилфурфурол, левулиновая кислота (ЛК) и гамма-валеролактон (ГВЛ) [1]. ГВЛ получил распространение в качестве промежуточного продукта для производства пищевых добавок, изготовления нейлона, но чаще ГВЛ рассматривается как платформа для производства жидкого биотоплива и зеленых растворителей. ГВЛ синтезируется путем гидрирования ЛК с применением различных катализаторов [2]. Цеолиты, как носители, широко применяются для создания гетерогенных катализаторов виду их доступности, развитой пористости, термической стабильности и наличия льюисовских и бренстедовских кислотных центров [3].

В рамках данной работы было показано, что синтезированные Ru-содержащие катализаторы на основе цеолита HZSM-5 позволяют обеспечить высокие выходы ГВЛ (до 98%). Кроме того, исследовалась возможность применения каталитических систем на основе RuO<sub>2</sub>, нанесенного на H-β, H-Y и H-Mordenite в сравнение с HZSM-5, в реакции селективного гидрирования ЛК до ГВЛ. Было показано, что наблюдаемая каталитическая активность зависит от концентрации кислотных центров различных типов на поверхности цеолитов, а также от морфологии выбранных цеолитов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-58-80008).*

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Cao S., Monnier J. R., Regalbuto J.R., J. Catal. 2017. V. 347. P. 72-78.
2. Huang X., Liu K., Vrijburg W.L. et al., Appl. Catal. B: Environ. 2020. V. 278. P. 119314.
3. Galadima A., Muraza O.J. Ind. Eng. Chem. 2015. V. 31. P. 1-14.

УДК: 541.49:581.1

Авлякулова Гульзар

## **ВЛИЯНИЕ БОРАТНОГО КОМПЛЕКСА НА ПРОДУКТИВНОСТЬ СВЕКЛЫ СТОЛОВОЙ**

Руководитель: О.В. Шилова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра агрохимии и земледелия

Большая часть микроэлементов, необходимых растениям для формирования урожая, эффективно усваивается в форме комплексонатов. Бор среди микроэлементов занимает особое место, поскольку растения нуждаются в нем в больших количествах по сравнению с другими биоактивными микроэлементами. Бор поглощается в виде борат-анионов, которые могут образовывать хелатные комплексы с некоторыми наиболее эффективными лигандами. С целью выяснения биологической активности этого соединения в условиях мелкоделяночного опыта было исследовано влияние боратного комплекса на основе этилендиаминдиантарной кислоты (В-ЭДДЯК) на продуктивность свеклы столовой сорта «Пабло».

Исследования проводились на экспериментальном участке кафедры агрохимии и земледелия на агротехнологическом полигоне Тверской ГСХА. Общая площадь участка – 100 м<sup>2</sup>, площадь одной делянки – 3 м<sup>2</sup>. Повторность опыта четырехкратная, расположение делянок – рендомизированное. Семена свеклы, предварительно замоченные на 24 часа в растворе боратного комплекса В-ЭДДЯК и взятых для сравнения растворах Н<sub>3</sub>ВО<sub>3</sub> и ЭДДЯК, в начале июня были высеяны в открытый грунт. Контролем служили семена, замоченные в Н<sub>2</sub>О dest. В качестве удобрений использовались дозы агрогумата: 1,5; 3 и 6 т/га. Растения после появления третьего настоящего листа опрыскивали соответствующими растворами с концентрацией 1,5 · 10<sup>-3</sup> моль/л.

Внесение агрогумата калия в разных дозах позволило увеличить количество подвижных форм азота, фосфора и калия в дерново-подзолистой почве по сравнению с контролем во все периоды определений (в среднем на 8,5 – 30,4%). Содержание подвижных форм элементов питания при использовании комплексонатов бора (В-ЭДДЯК) на фоне агрогумата уступало их значениям, но позволило получить высокий урожай корнеплодов столовой свеклы.

Наибольшая урожайность столовой свеклы получена на вариантах с применением В-ЭДДЯК и Н<sub>3</sub>ВО<sub>3</sub> на фоне агрогумата и составила 6,9 кг/м<sup>2</sup> и 6,2 кг/м<sup>2</sup> (прибавка к контролю – 1,8 кг/м<sup>2</sup> и 1,1 кг/м<sup>2</sup> соответственно). В корнеплодах, выращенных на фоне агрогумата с обработкой растений борной кислотой, содержалось больше количество витамина С (23,3 мг/100 корнеплодов). Наименьшим количеством аскорбиновой кислоты в корнеплодах столовой свеклы отличался вариант с использованием ЭДДЯК (20,1 мг/100 г).

УДК: 577.1; 543.422.27

Адамян Анна Нориковна

## ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ В СИСТЕМАХ НА ОСНОВЕ L-ЦИСТЕИНА, СОЛЕЙ СЕРЕБРА И ПОЛИГУАНИДИНА

Руководители: П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра физической химии

Проблема создания высокоэффективных дезинфицирующих средств на сегодняшний день является очень актуальной в связи со значительным ростом количества микробных инфекций. При сливании водных растворов L-цистеина и соли серебра образуются супрамолекулы из молекул меркаптида серебра в цистеин-серебряном растворе (ЦСР), а введение электролитов вызывает процесс гелеобразования ЦСР [1]. Выяснилось, что водные растворы полигуанидин гидрохлорида (ПГМГ-ГХ) и ЦСР хорошо совместимы друг с другом и образуют гидрогель без введения электролитов. ЦСР и гидрогели на его основе являются интересными объектами для изучения процессов самоорганизации в растворах.

В настоящей работе исследованы вязкостные и структурные свойства новых растворов и гидрогелей на основе ПГМГ-ГХ и ЦСР с помощью различных физико-химических методов: УФ спектроскопии, вискозиметрии, рН-метрии. Выяснилось, что растворы при различной концентрации ПГМГ-ГХ имеют и разную вязкость. Для приготовления гидрогеля брали 0.025 мл водного раствора ПГМГ-ГХ с концентрацией 0.5% и уже через 30 мин вязкость изменялась всего на 1 единицу по сравнению со значением вязкости исходного ЦСР. Рассмотрение электронных спектров растворов показало, что при введении в ЦСР 0.1% (0.0375 мл) ПГМГ-ГХ полосы поглощения 314 и 394 нм исчезают, а уже при 0.1% (0.05 мл) появляются новые полосы поглощения ~260 и 375 нм. При этом в самом растворе ПГМГ-ГХ полосы поглощения отсутствуют. Подобное явление наблюдается при введении в раствор ЦСР и хлорида натрия. Это свидетельствует о том, что значительную роль в гелеобразовании, а также и в изменении УФ спектров играет хлорид-ион. Выяснилось, гидрогели на основе ЦСР + ПГМГ-ГХ проявляют высокую антибактериальную и противогрибковую активность, что позволит в дальнейшем использовать их в медицинских целях.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №20-33-90096) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.*

УДК: 631.1:631.84

Азизов Гайратшох Назарходжаевич

## **ВЛИЯНИЕ ПОДКОРМКИ НА ПРОДУКТИВНОСТЬ ОВСА**

Руководитель: И. В. Велюханов

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра агрохимии и земледелия

Исследования по изучению влияния азотной подкормки на урожайность овса проводились в условиях вегетационного периода 2019 г. на опытном поле технологического факультета ТГСХА.

Цель исследований – выявить оптимальную дозу подкормки посевов овса азотными удобрениями и ее влияние на урожайность культуры.

Погодные условия в вегетационный период роста и развития овса оказались удовлетворительными по тепло - влагообеспеченности.

Как показывают исследования многих авторов, проведенные в разных регионах страны, корневые и некорневые подкормки азотными удобрениями играют определенную роль в развитии зерновых культур, однако эффективность их во многом определяется погодными условиями и соблюдением технологии их применения.

Наши наблюдения показали, что в фазу выметывания преимущество по приросту растений в высоту оставалось за некорневой подкормкой посевов овса мочевиной в дозе  $N_{10}$  и корневой подкормкой аммиачной селитрой в дозе  $N_{30}$ . Высота растений была на 0,6-3,2 см больше, чем на контрольном варианте. Некорневые и корневые подкормки посевов овса способствовали развитию листового аппарата, что в свою очередь отразилось на площади ассимиляционного аппарата. На действие подкормки оказали погодные условия, которые в этот период по влагообеспеченности были неудовлетворительными. Подкормка аммиачной селитрой и мочевиной способствовали улучшению структуры урожая по сравнению с контрольным вариантом. Максимальное количество зерен в метелке и масса зерна с метелки наблюдалась при некорневой подкормке посевов овса аммиачной селитрой и мочевиной в дозе  $N_{30}$ . Наибольшая урожайность овса в 2019 г. наблюдалась при некорневой подкормке посевов овса аммиачной селитрой в дозе  $N_{30}$  и мочевиной в дозе  $N_{10}$ . Прибавка урожая составила соответственно 8,9-12,0 ц /га. Корневая подкормка посевов овса также способствовала увеличению урожайности на 4,8 - 5,0 ц/га. Таким образом, эффективность подкормки посевов овса азотными удобрениями мочевиной или аммиачной селитрой определялась погодными условиями. В условиях 2019г наибольшее влияние на урожайность овса оказали некорневые подкормки аммиачной селитрой в дозе  $N_{30}$  и мочевиной в дозе  $N_{10}$ .

УДК: 548.57

Али Майс

## ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ КЕРАМИК НИОБАТА НАТРИЯ С РАЗНЫМ РЕЖИМОМ СИНТЕЗА

Руководитель: О.В. Малышкина

Тверской государственный университет  
Кафедра прикладной физики

В работе исследованы температурные зависимости диэлектрической проницаемости керамики ниобата натрия (NN) на частотах 1 Гц – 10 МГц. Исследовались образцы с разным режимом синтеза материала NN [1]. В результате проведенных исследований установлено, что образцы с одиночным синтезом имеют одинаковый ход температурных зависимостей с четким максимумом при 370°C (рис.1, а). Исключение составили измерения на частотах 1 и 10 Гц, в этом случае имеется промежуточный максимум при 260°C и перегиб при 370°C. Двойной синтез приводит к появлению аномалий в температурном интервале 250 – 530 °С, наблюдаемые у образцов, полученных одиночным синтезом, максимумы у этих образцов отсутствуют (рис.1, б). Данные результаты полностью согласуются со сделанным ранее [1] выводом о наличии сегнетоэлектрических свойств у материалов с одним синтезом, и антисегнетоэлектрических с двойным синтезом.

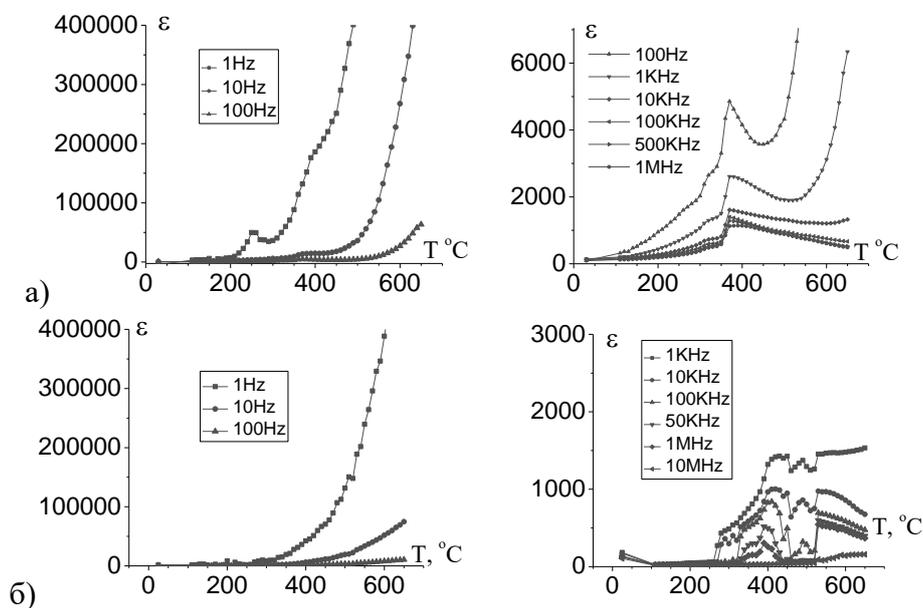


Рис. 1. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости образцов керамики NN, синтезированного при  $T=700^{\circ}\text{C}$ . а – одиночный синтез; б – двойной

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Malyshkina O.V., Ali M., Varabanova E.V., Ivanova A.I Effect of preparation conditions on the grains formation and domain structure of the sodium niobate ceramics. *Ferroelectrics*, 2020, V.567 (1), P. 197-205.

УДК: 665.941.1

Антонова Вероника Сергеевна

## **ВЛИЯНИЕ ФЕРМЕНТАТИВНОГО ГИДРОЛИЗА НА ПОЛУЧЕНИЕ РАСПУШЕННОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ ДЛЯ ГИГИЕНИЧЕСКИХ ИЗДЕЛИЙ РАЗОВОГО ПОЛЬЗОВАНИЯ**

Руководитель: И.И. Осовская

Санкт-Петербургский государственный университет  
промышленных технологий и дизайна

Высшая школа технологии и энергетики, г. Санкт-Петербург  
Кафедра физической и коллоидной химии

В настоящее время исследователи обращаются к поиску методов, направленных на получение бумаги аэродинамическим способом формования (АДФ), который имеет преимущества и может работать в районах с дефицитом пресной воды и без существенных затрат энергии. Целью данного исследования является получение распушенного материала из влажных целлюлозных волокон в отсутствие фибриллирования посредством модификации поверхности волокна ферментативным гидролизом. Исследование направлено на оптимизацию гидролиза, выбор методов его контроля, на получение физико-химических и физико-механических характеристик целлюлозы. Объектом исследования служили промышленные образцы сульфатной беленой целлюлозы из лиственных пород древесины. В качестве фермента был использован BANZYME L90, являющийся целлюлазным ферментным препаратом, произведенным с использованием генетически модифицированных штаммов *Trichoderma reesei*. Ферментативный гидролиз проводили при температуре 50 °С, времени воздействия 3-10 мин, с расходом фермента 0,10 г/кг целлюлозы. Выявлены оптимальные условия ферментативного гидролиза для улучшения бумагообразующих свойств целлюлозы. Обработка целлюлозы ферментом при оптимальных условиях позволяет сохранить целостность волокна, что способствует сохранению волокнистой структуры распушенного слоя, снизить время роспуска на волокна, что позволяет сократить энергозатраты при получении распушенной целлюлозы для гигиенических изделий разового пользования.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Байкова В.С., Осовская И.И., Полторацкий Г.М. Влияние размолла на термодинамические свойства целлюлозы // *Химия растительного сырья*. 2015. №1. С. 175-180.
2. Аким Э.Л., Абрамов И.Н., Коваленко М.В., Сазонова Н.А. Размол как путь направленного изменения физико-механических свойств композиционных материалов на основе целлюлозы из лиственницы // *Целлюлоза. Бумага. Картон*. 2012. №6. С. 38-44.

УДК: 615.322

Афонькин Никита Сергеевич

## **СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА С ПОМОЩЬЮ ВОДНЫХ ЭКСТРАКТОВ ЛИСТЬЕВ КРАПИВЫ ДВУДОМНОЙ**

Руководитель: С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Живые организмы, например, растения, способны взаимодействовать с катионами благородных и тяжелых металлов, при этом происходит восстановление катиона металла до нейтральных атомов с последующей их агрегацией. В качестве биовосстановителей выступают биологические активные вещества – метаболиты, содержащиеся в клетках и тканях растений, животных и микроорганизмов.

Цель данной работы – изучение влияния содержания биоактивных веществ в образцах крапивы двудомной, собранных в местах с различной антропогенной нагрузкой, на синтез наночастиц серебра (НЧС) с помощью метода спектроскопии УФ-видимого диапазона. Растения были собраны в 2020 году в шести районах города Твери: “СНТ” Светлый, Парк Победы, Площадь Гагарина, ЖК Volga Life, мкрн. Мигалово, “СНТ” Рябинки.

Для проведения спектрального анализа листьев растений были высушены и измельчены. Для регистрации спектров на спектрометре «Evolution Array» фирмы «Thermo Scientific» были приготовлены водные и спиртовые экстракты образцов. Синтез НЧС осуществили добавлением нитрата серебра  $\text{AgNO}_3$  с концентрацией  $1 \cdot 10^{-2}$  М в водные экстракты. Формирование НЧС в водных экстрактах контролировали через разные промежутки времени – 5 минут, 2 часа, 1 день.

С помощью спектральных исследований установлено, что антропогенные факторы существенно влияют на химический состав листьев крапивы двудомной, что подтверждается разным содержанием фенольных соединений, оксибензойных кислот, антоцианов, хлорофилла и др. в экстрактах растений. Обнаружена прямая связь между содержанием биоактивных веществ и концентрацией, и размером наночастиц серебра, образованных в водных экстрактах образцов крапивы. Таким образом, крапива двудомная, являясь лекарственным растением, может успешно использоваться в качестве биоиндикатора для оценки экологической обстановки окружающей среды.

*Работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии ЦКП ТвГУ*

УДК: 544-971:544.31.031

Ахметшина Екатерина Степановна

## ГОМОДЕСМОТИЧЕСКИЙ МЕТОД РАЗДЕЛЕНИЯ И КОЛИЧЕСТВЕННОГО УЧЕТА НЕВАЛЕНТНЫХ ЭФФЕКТОВ РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ

Руководитель: С.Л. Хурсан

УфИХ УФИЦ РАН, г. Уфа  
лаборатория химической физики

Настоящая работа посвящена разработке высокоточной методики определения энергий невалентных взаимодействий различной природы. В качестве анализируемых структур выбраны полизамещенные фтор- и метилциклопропаны. Анализ проводили с использованием авторской методологии [1], основанной на теоретико-графовом анализе. Получены полные наборы гомодесмотических реакций (ГДР) исследуемых структур. При конструировании учитывали балансы: изогирический, атомарный, связевой, групповой, энантиомерный. Абсолютные энтальпии участников ГДР получены с использованием композитного метода G4, из которых рассчитаны величины тепловых эффектов ГДР ( $\Delta_r H^\circ$ ). Показано, что для одного и того же соединения величина  $\Delta_r H^\circ$  может значительно меняться (до 75 кДж/моль) в полных наборах ГДР, что обусловлено изменяющимся от реакции к реакции набором невалентных эффектов в структурах всех участников ГДР.

Разделение стерической энергии  $SE$ , как суммы энергий неучтенных невалентных взаимодействий, проведено с помощью множественного регрессионного анализа. Определены энергетические вклады девяти невалентных эффектов в циклопропанах и референсных соединениях и рассчитаны «чистые» значения энергий напряжения цикла ( $RSE$ ) кДж/моль для фторированных циклопропанов, находящихся в диапазоне от 137.9 кДж/моль (фторциклопропан) до 194.8 кДж/моль (гексафторциклопропан). Для метилциклопропанов алкильный заместитель не оказывает влияния на величину  $RSE$ : для всех соединений этой группы «чистая»  $RSE$  равна  $118.1 \pm 1.4$  кДж/моль. Величины  $RSE$  для фторзамещенных циклов ожидаемо выше, что обусловлено влиянием электроотрицательного атома фтора. Таким образом, разработана высокоточная методика определения энергетики невалентных взаимодействий различной природы, разделение которых возможно с использованием процедуры множественного регрессионного анализа. Методика является универсальной и применима к различным классам органических соединений.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 20-33-90194).*

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хурсан, С. Л.; Исмагилова, А. С.; Ахмеров, А. А.; Спивак, С. И.; Ж. Физ. Хим. 2016, 90 (4), 569–575 с.

УДК: 541.66

Бабуркин Павел Олегович

**УПРАВЛЕНИЕ МОРФОЛОГИЕЙ ФОТОАКТИВНОГО СЛОЯ  
ПОЛИМЕРНОГО НАНОКОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ  
СОПРЯЖЕННЫХ ПОЛИМЕРОВ И КВАНТОВЫХ ТОЧЕК**

Руководитель: П.В. Комаров

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра физической химии

Полимерные солнечные фотоэлементы с объемным гетеропереходом рассматриваются в качестве перспективных экологически чистых источников дешевой электрической энергии. Низкая себестоимость производства, небольшой вес, возможность изготовления гибких устройств большой площади являются их главными преимуществами по отношению к традиционным кремниевым солнечным батареям. Получение высокоэффективных и долговечных пластиковых солнечных батарей требует интенсивных исследований, нацеленных на выявление сопряженных полимеров (СП) способных формировать термостабильные смеси с квантовыми точками, которые могут выдерживать большое количество циклов нагрев/охлаждение.

В докладе обсуждается исследование влияния химического строения СП на термофизические свойства нанокompозитов на их основе, с использованием метода диссипативной динамики частиц. Мы разработали крупнозернистые модели двух СП РТВ7-th и PffBT4-2OD для изучения эволюции нанокompозитов полимер/фуллерены. Выбранные полимеры характеризуются узкой шириной запрещенной зоны. Исползованный способ огрубления позволяет сохранить основные структурные особенности исходных СП цепей. Поскольку точная структура изучаемых нанокompозитов является неизвестной, это не позволяет выполнить точную “настройку” созданных крупнозернистых моделей, что сильно затрудняет моделирование таких систем.

Выполненные оценки скорости фазового разделения цепей полимерной матрицы и фуллеренов в моделях нанокompозитов на основе РТВ7-th и PffBT4-2OD показывают снижение динамики перераспределения фуллеренов в структуре фотоактивного слоя в сравнении с реперной системой на основе РЗНТ

***Благодарности:** работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 19-53-52004) с использованием вычислительных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСЦ РАН).*

УДК: 316.3

Баданина Полина Алексеевна

## **ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ БАД-ПАРАФАРМАЦЕВТИКОВ НА ОСНОВЕ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ТРАВ**

Руководитель: Е.Р Усовик

Муниципальное образовательное учреждение Среднеобразовательная школа № 45  
с углубленным изучением предметов естественнонаучной направленности, Тверь

В настоящее время практически каждый человек пользовался лекарственными препаратами. Это связано с разнообразным и большим количеством возбудителей заболеваний людей и животных в современном мире. Однако, кроме лекарств, чтобы поддержать организм в тонусе и не заболеть, население планеты использует вспомогательные средства. Чаще всего люди употребляют лекарственные растения. Современные производители говорят о позитивном влиянии фитотерапии. Поэтому всё чаще в продажу поступают препараты, в состав которых входят лечебные травы, грибы. Все они выпускаются под обозначением «биологически активная добавка» (БАД).

БАД — это в основном натуральные средства, которое имеет направленное физиологическое действие и применяются для профилактики сразу нескольких заболеваний. При этом эффекты БАД не являются избирательными и в большинстве случаев реализуются путем инициации универсальных механизмов адаптационных реакций организма на воздействие внешних и внутренних факторов окружающей среды [1]. Положительное действие от БАВ, не относящихся к эссенциальным или минорным компонентам пищи, сомнительно. Не все эффекторы (действующие вещества) БАД установлены, изучены, поэтому могут быть не безопасны для организма. Поэтому изучение биологических свойств БАД является актуальным в настоящее время.

Цель исследовательской работы — изучение химических и биологических свойств БАД фирмы «Happiness».

Для исследований были выбраны биологически активные добавки фармацевтической компании SHENGLONG GROUP (Китай), выделенные производителем в программу «Очистка здоровья»: капсулы «Сюе Бань Люй», чай «Спутник прекрасной еды», почечный чай, Шенлунгский чай «Баланс +», жидкость «1+1 эффект».

Все изучаемые добавки содержали антиалиментарные факторы по отношению к панкреатической амилазе.

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Илларионова Е.А., Сыроватский И.П. Парафармацевтики. Иркутск: ИГМУ. 2014. 29 с.

УДК 54.056; 577.15; 577.29

Базулева Виктория Александровна

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МЕТОДОВ ОЧИСТКИ НА РАЗМЕРЫ БЕЛКОВЫХ ЧАСТИЦ

Руководитель: Е.А. Прутенская, к.б.н., доцент

Тверской государственный технический университет  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

В настоящее время растительные белки, содержащиеся в бобовых культурах, представляют научный интерес для многих исследователей. Большое внимание уделяется биологической активности получаемых белковых веществ. Современные методы позволяют получать белковые изоляты с высокой ингибиторной активностью по отношению к пищеварительным ферментам.

В научной работе было проведено исследование по влиянию методов выделения и очистки белковых ингибиторов из бобовых *Phaseolus vulgaris* *Kidney* на активность и размеры полученных веществ. Выделение ингибиторов осуществляли путем экстракции при пониженной температуре и в ультразвуковом поле с помощью буфера. Крахмальную фракцию удаляли центрифугированием, затем проводили фракционирование белковых веществ. Образцы лиофильно высушивали.

В таблице представлены результаты исследований размера частиц и степень ингибирования панкреатической амилазы.

Таблица

Данные анализа размеров белковых молекул  
с разными методами очистки белковых веществ

Методы очистки	Основной диаметр, нм	Количество белковых фракций в растворе	Степень ингибирования, %
Экстракция при 4 <sup>0</sup> С	682.8	3	79
Экстракция в УЗ	550.6	2	89
Очистка с использованием диализа	162.0	3	98
Очистка с помощью микрофилтрования	190.7	3	96

На основе данных можно сделать вывод, что образцы, пропущенные через фильтр с микропорами, содержат белковые вещества с меньшими размерами частиц. Ультразвуковое воздействие способствует повышению биологической активности. Дополнительные методы очистки позволяют увеличить ингибиторную активность по отношению к  $\alpha$ -амилазам, путем снижения посторонних веществ в целевом продукте.

Работа выполнена на основании гранта РФФИ № 19-08-00185.

УДК 537.6

Байкова Анастасия Алексеевна

## АНАЛИЗ МЕТОДОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНЕРГИИ ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ ОДНООСНЫХ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ

Руководитель: М.Б. Ляхова

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра физики конденсированного состояния

Поверхностная плотность энергии доменных границ ( $\gamma$ ) является важной характеристикой магнитного материала, например, она определяет величину его коэрцитивности. Существует несколько методов определения энергии доменных границ  $\gamma$ . Первый – прямой расчет по формулам, полученным в рамках микромагнетизма [1]. Второй часто применяемый – метод Боденбергера-Хуберта [2].

В данной работе для монокристаллов кобальта и соединений  $\text{SmCo}_5$ ,  $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ ,  $\text{GdCo}_5$  и  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  рассчитана величина  $\gamma$  по теоретическим формулам [1] и методом Боденбергера-Хуберта [2]. Получено хорошее совпадение результатов расчетов  $\gamma$  для соединений  $\text{SmCo}_5$ ,  $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$  и  $\text{GdCo}_5$ .

На примере монокристалла  $\text{Y}_3\text{Fe}_{26,5}\text{Ti}_{2,7}$  проанализирована возможность применения метода Боденбергера-Хуберта к магнитно-силовым изображениям доменной структуры одноосных ферромагнетиков, полученных с использованием двухпроходной методики. Показано, что ширина доменов ( $L$ ) на МСМ-изображениях линейно возрастает с увеличением высоты сканирования ( $dz$ ). При  $dz = 50$  мкм  $L$  возрастает в 1,2 раза, при  $dz = 100$  мкм – в 1,4 раза, при  $dz = 200$  мкм – почти в 2 раза.

Таким образом для использования метода Боденбергера-Хуберта в случае двухпроходной МСМ-методики нужно выбирать минимально возможную высоту сканирования  $dz$ . При больших  $dz$  необходимо корректировать числовой коэффициент  $\beta$  в формуле метода [2] пропорционально  $dz$ .

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kronmuller H., Fahnle M. Micromagnetism and the microstructure of ferromagnetic solids // Max-Planck-Institut fur Metallforschung, Stuttgart, Germany, 2003. 432 с.
2. Bodenberger R., Hubert A. Zur Bestimmung der Blochwandenergie von einachsigen Ferromagneten // Phys. Stat. Sol. (a). 1977. V.44. P.K7–K11.
3. Миронов В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии // Нижний Новгород, 2004. 110 с.

УДК 54.057

Балакшина Дарья Вадимовна

## КАСКАДНЫЕ РЕАКЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МУЛЬТИФЕРМЕНТНЫХ СИСТЕМ

Руководитель: О.В. Гребенникова, к.х.н., доцент

Тверской государственной технической университет  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Каскадные реакции, существующие в природе, где различные ферменты расположены в непосредственной близости друг от друга, вдохновляют исследователей на реализацию аналогичного подхода при проектировании разнообразных биокатализаторов, объединяющих несколько ферментов на одной и той же подложке [1,2]. Основными преимуществами мультиферментных биокатализаторов являются устойчивость однокомпонентных синтезов, а также исключение стадий выделения и очистки промежуточных продуктов. В свою очередь, каскадные реакции весьма перспективны для устойчивых процессов получения экологически чистых химических веществ и материалов без опасных побочных продуктов. Важными параметрами, которым следует следовать в мультиферментных катализаторах, являются соотношение ферментов, их распределение на поверхности носителя, а также доступ ферментов к субстратам [4].

В данной работе исследовалась работа биокаталитической системы на основе глюкооксидазы и пероксидазы в двух последовательных реакциях – окислении D-глюкозы и 2,2'-азино-бис-(3-этилбензтиозолин-6-сульфокислоты) диаммониевой соли. Мультиферментная система была синтезирована путем иммобилизации ферментов на магнитные наночастицы.

*Работа выполнена в рамках гранта СП-4543.2021.4.*

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sperl J.M., Sieber V. Multienzyme cascade reactions-status and recent advances. ACS Catal. 2018. vol. 8. pp. 2385-2396.
2. Hwang E.T., Lee S. Multienzymatic Cascade Reactions via Enzyme Complex by Immobilization. ACS Catal. 2019. vol. 9 (5). pp. 4402–4425.
3. Vranish J.N., Ancona M.G., Oh E., Susumu K., Medintz I.L. Enhancing coupled enzymatic activity by conjugating one enzyme to a nanoparticle. Nanoscale. 2017. vol. 9. pp. 5172-5187.

УДК 541.49:615.33

Баранник Александр Андреевич

**ФОРМИРОВАНИЕ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ  
ПОД ВЛИЯНИЕМ ИОДИД-ИОНА  
В L-ЦИСТЕИН- $\text{AgNO}_3$  СИСТЕМАХ**

Руководитель: С. Д. Хижняк

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Супрамолекулярные гидрогели на основе низкомолекулярных соединений привлекают повышенное внимание исследователей как перспективные материалы для биомедицинского применения и как объекты для изучения процессов самосборки. Гелеобразование в таких системах может быть инициировано различными факторами – рН, нагревание, облучение и др. Целью данной работы является изучение процессов гелеобразования в низкоконцентрированных водных системах на основе аминокислоты L-цистеин, нитрата серебра в присутствии иодид иона.

В работе были получены прозрачные, устойчивые во времени гидрогели путем смешения водных растворов исходных компонентов L-цистеина (L-Cys) и нитрата серебра под воздействием иодид аниона. В образцах варьировали содержание нитрата серебра при постоянном содержании аминокислоты и иодида калия, при этом молярное соотношение компонентов ( $\text{Ag}^+/\text{Cys}$ ) изменяли в интервале 1.5 – 2.2, концентрация KI составляла 0.75 мМ. Для исследования процессов гелеобразования были использованы методы УФ спектроскопии (спектрометр “Evolution Array”, “Thermo Scientific”, динамического светорассеяния (Nanosizer ZS, “Malvern”) и вискозиметрии (вибровискозиметр SV-10 A&D “Company”).

В результате исследований было установлено, что наиболее стабильны во времени гидрогели с высоким содержанием нитрата серебра. При условии хранения в темноте образцы сохраняют свою структуру более 3 месяцев, что подтверждается данными УФ спектроскопии. Этим образцам соответствуют и более высокие показатели вязкости. Следует отметить, что все гель-образцы проявляют тиксотропные свойства. Таким образом, в данной работе удалось синтезировать стабильные L-Cys- $\text{AgNO}_3$  гидрогели, используя в качестве инициатора гелеобразования иодид-анион. Изучение процессов самосборки в этих системах будет продолжено.

*Данная работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии центра коллективного пользования ТвГУ*

УДК 577.1:543.422.27

Барсегян Тамара Арсеновна

## ВЛИЯНИЕ ХЛОРГЕКСИДИНА НА ПРОЦЕСС САМООРГАНИЗАЦИИ В ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОМ РАСТВОРЕ

Руководители: П.М. Пахомов, А.Н. Адамян

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

В связи со сложившейся эпидемиологической обстановкой в стране и мире актуальны научные исследования, направленные на поиск новых антисептических препаратов. Известно, что цистеин-серебряный-раствор (ЦСР) обладает антисептическими свойствами. [1]

В настоящей работе рассмотрена гипотеза об образовании гидрогеля из ЦСР раствора путем добавления в него хлоргексидина вместо электролита. Хлоргексидин обладает бактерицидными свойствами, а также в молекуле хлоргексидина присутствует атомов хлора, что может способствовать процессу гелеобразования ЦСР [2].

В результате проведенных исследований нам пока не удалось получить гидрогель. Настоящий вывод был сделан на основе визуальных наблюдений и данных метода УФ-спектроскопии. Рассмотрев структурную формулу молекулы хлоргексидин биклюконата, можно заключить, что из-за сравнительно большой длины молекулы, наличия бензойных колец, а также большого числа NH-групп процесс гелеобразования в ЦСР затруднителен. Исследования процесса самоорганизации в системе на основе L-цистеина, нитрата серебра и хлоргексидина продолжаются.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. О.А. Baranova, N.I. Kuz' min, T.I. Samsonova, I.S. Rebetskaya, O.P. Petrova, P.M. Pakhomov, S.D. Khizhnyak, P.V. Komarov, and M.M. Ovchinnikov. // Fibre Chemistry, 2011. V. 43, N1, P.90-103. <https://doi.org/10.1007/s10692-011-9313-4>.
2. П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк, М.М. Овчинников, П.В. Комаров. Супрамолекулярные гели. Тверь: ТвГУ. 2011. 269 с.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №20-33-90096) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.*

УДК 66.097.3

Бахвалова Елена Сергеевна

## **ВЛИЯНИЕ ТИПА РЕАКТОРА НА ПРОТЕКАНИЕ РЕАКЦИИ СУЗУКИ В ПРИСУТСТВИИ ПОЛИМЕРНОГО БИМЕТАЛЛИЧЕСКОГО КАТАЛИЗАТОРА**

Руководители: М.Г. Сульман, Л.Ж. Никошвили

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Региональный технологический центр

Известно, что Au (I) является изоэлектронным с Pd (0) и может катализировать реакцию Сузуки-Мияура [1].

В рамках данной работы добавление Au в состав Pd-содержащей каталитической системы на основе сверхсшитого полистирола марки MN100 в качестве металла-модификатора оказало положительное влияние на протекание кросс-сочетания 4-броманизола и фенилбороновой кислоты, поэтому было проведено сравнение биметаллических катализаторов с близким процентным содержанием палладия, но синтезированных с применением разных прекурсоров:  $\text{PdCl}_2(\text{CH}_3\text{CN})_2$  и  $\text{Pd}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ .

Биметаллические катализаторы на основе ацетата палладия оказались более активны по сравнению с образцами на основе  $\text{PdCl}_2(\text{CH}_3\text{CN})_2$ . Таким образом, для наиболее активного катализатора, содержащего 1%(масс.) Pd, было проведено исследование влияния типа реактора на протекание процесса: реактор качания и термостатируемый стеклянный реактор, установленный на магнитной мешалке.

В результате реакция Сузуки прошла эффективнее в реакторе с перемешиванием магнитной мешалкой. Конверсия 4-броманизола достигла 100% за 15 мин при сохранении селективности по 4-метоксибифенилу порядка 94-95% независимо от типа реактора.

Более высокая конверсия субстрата в реакторе с перемешиванием магнитной мешалкой, вероятно, не связана с ограничениями массопереноса, поскольку скорость перемешивания, как было выяснено ранее, оказывает слабое влияние на протекание реакции. Наблюдаемое различие может быть связано с составом газовой фазы (азот в реакторе качания и воздух в реакторе с магнитной мешалкой).

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда  
(проект №20-19-00386).*

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Panayotov, D.A. Surface chemistry of Au/TiO<sub>2</sub>: Thermally and photolytically activated reactions Surf. Sci. Rep. 2016. V. 71. P. 77 – 271.

УДК: 620.193.4

Беззубов Александр Николаевич

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КОРРОЗИИ СТАЛИ Ст3 В ВОДНОЙ СРЕДЕ И ПОДБОР ИНГИБИТОРОВ

Руководитель: О.А. Голованова

Омский Государственный Университет им. Ф.М. Достоевского  
Кафедра неорганической химии

Коррозия стали Ст3 в нейтральной водной среде проходит с образованием гидроксидов различного состава, которые легко отделяются от детали механическим воздействием. Для образования плотной защитной пленки на поверхности детали используют ингибиторы-пленкообразователи, такие как  $\text{Na}_3\text{PO}_4$ . Так же олигомеры, полимеры и ПАВ способны ингибировать коррозию стали.

В ходе исследований методом измерения глубинного показателя коррозии было изучено влияние ингибиторов в различных концентрациях с целью подбора основных компонентов для создания ингибирующей смеси, которая позволит достичь 70%-ой степени защиты от коррозии. Использовались такие ингибиторы коррозии, как  $\text{Na}_3\text{PO}_4$ ,  $\text{Na}_2\text{HPO}_4$ ,  $\text{Na}_3\text{PO}_4$  + желатин, олеат натрия. Краткие результаты исследований представлены в табл. 1.

Таблица 1

Степень защиты (Р) от коррозии в зависимости от ингибиторов и их концентраций.

Ингибитор	Концентрация, %	Р, %
$\text{Na}_3\text{PO}_4$	0.0005	0
$\text{Na}_3\text{PO}_4$	0.001	1.8
$\text{Na}_3\text{PO}_4$	0.025	51.1
$\text{Na}_3\text{PO}_4$	0.05	71.5
$\text{Na}_3\text{PO}_4$	0.25	91.0
$\text{Na}_3\text{PO}_4$	0.45	94.0
$\text{Na}_2\text{HPO}_4$	0.0005	13.4
$\text{Na}_2\text{HPO}_4$	0.001	7.4
$\text{Na}_2\text{HPO}_4$	0.025	87.5
$\text{Na}_2\text{HPO}_4$	0.05	68.5
$\text{Na}_2\text{HPO}_4$	0.25	87.6
$\text{Na}_2\text{HPO}_4$	0.45	82.1
Олеат натрия	0.07	100.0
Олеат натрия	0.14	80.6
Олеат натрия	0.175	98.1
Олеат натрия	0.21	100.0
Олеат натрия	0.245	96.6
Олеат натрия	0.28	99.4
$\text{Na}_3\text{PO}_4$ +0,1% желатин	0.0005	81.8
$\text{Na}_3\text{PO}_4$ +0,1% желатин	0.001	81.4
$\text{Na}_3\text{PO}_4$ +0,1% желатин	0.025	76.4

УДК: 537.62

Белявский Михаил Андреевич

## ПРИМЕНЕНИЕ ПРОДУКТА WEB-СЕРВИС PARTICLESNN ДЛЯ АНАЛИЗА ИЗОБРАЖЕНИЙ МИКРОСТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЙ $GdCo_4Cu$

Руководитель: Ю.В. Кузнецова

Тверской государственный университет  
Кафедра физики конденсированного состояния

В работе проведен анализ полученных методом атомно–силовой микроскопии на установке сканирующего зондового микроскопа Solver P47 изображений микроструктуры соединений  $GdCo_4Cu$  с помощью программного продукта Web-сервис ParticlesNN[1]. Данный продукт создан на основе нейронной сети CascadeRCNN, обученной на изображениях наночастиц. Обученная нейронная сеть способна распознавать наночастицы как четкие контуры. Web-сервис производит обработку полученных результатов, определяя размеры контуров и их статистические параметры – степень покрытия, концентрацию, средний размер, распределение частиц по размерам.

В настоящей работе для исследований были отобраны образцы квазибинарного соединения  $GdCo_4Cu$  после гомогенизирующего отжига и построены гистограммы распределения ликвационных неоднородностей по размерам, которые коррелируют с данными, ранее полученными с помощью инструмента программы микроскопа «Grain Analysis»[2].

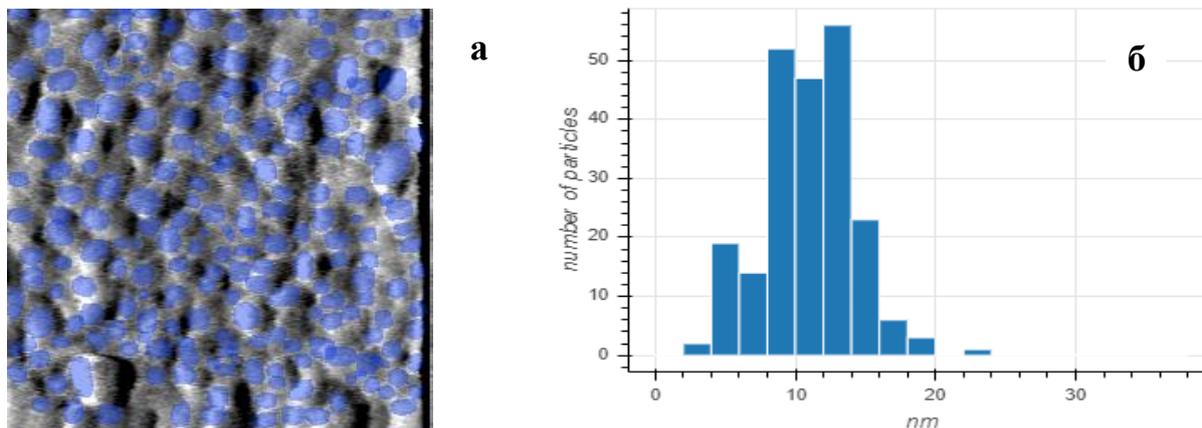


Рис.1 Изображение рельефа поверхности образца  $GdCo_4Cu$  с учетом обработки ParticlesNN (а), полученная гистограмма распределения (б).  
Размер исходного скана 500x500 нм.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ParticlesNN. Оф. сайт: <http://particlesnn.nsu.ru/> (дата обращения: 01.02.21)
2. Ю.В. Кузнецова, О.Б. Дегтева, Н.П. Супонев, П.С. Салев // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2011. – №11. – С. 89-94.

УДК: 544.473:66.097.5

Бертова Алёна Вениаминовна

## **ВЛИЯНИЕ СТЕПЕНИ СШИВКИ ПОЛИСТИРОЛА НА СВОЙСТВА ПАЛЛАДИЕВЫХ ПОЛИМЕРНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ ГИДРИРОВАНИЯ**

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

Тверской государственный технический университет, г. Тверь  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Сшивание является важной стадией в производстве высокопористых полимеров. Полимеры с высокой степенью сшивки могут быть синтезированы посредством различных методик с применением широкого спектра мономеров и функциональных групп. Сшитые полимеры, как правило, обладают хорошей механической, химической и термической стабильностью, что позволяет использовать их в качестве носителей при создании катализаторов.

В данном исследовании было проведено сравнение катализаторов гидрирования с использованием сверхсшитого полистирола (СПС) и макропористого полистирола (МПС) в качестве носителей активного металла – палладия. Катализаторы на основе СПС и МПС синтезировали методом пропитки по «влагоемкости» (импрегнации) из раствора, содержащего прекурсор палладия. Таким образом, были получены катализаторы 1%(масс.)-Pd/СПС и 1%(масс.)-Pd/МПС. Синтезированные катализаторы были протестированы в реакции селективного гидрирования тройной связи диметилэтинилкарбинола (ДМЭК) до диметилвинилкарбинола (ДМВК). Реакция проводилась в термостатируемом стеклянном реакторе качания при атмосферном давлении  $H_2$  при температуре  $90^\circ C$ , в качестве растворителя использовался толуол. Каждый катализатор восстанавливался водородом в условиях реакции в течение 1 ч перед помещением в реактор субстрата (ДМЭК).

Сравнивая свойства катализаторов на основе СПС и МПС, можно сделать вывод, что сшивка полистирола оказывает положительное влияние на свойства катализатора: активность возрастает в 2.3 раза, а также повышается селективность по отношению к ДМВК с 98% до 99% при 50% конверсии ДМЭК. Такое сравнение помогло понять важность стадии сшивки при синтезе полимера, на основе которого в дальнейшем производят катализатор.

УДК: 546.02

Беспалов Дмитрий Вячеславович

**СИНТЕЗ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ИОНОВ КАЛЬЦИЯ (II)  
С АМИНОКИСЛОТАМИ**

Руководитель: О.А. Голованова

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского  
Химический факультет, кафедра неорганической химии

В данной работе осуществлён синтез комплексов кальция (II) с аминокислотами из водных растворов соли тетрагидронитрат кальция и растворов соответствующих аминокислот, а именно изолейцин, глицин, фенилаланин, цистеин, триптофан, глутаминовая кислота.

Приведены данные спектроскопических характеристик полученных соединений по методу инфракрасной Фурье спектроскопии, спектры исследуемых образцов регистрировались в диапазоне от 500 до 4000  $\text{см}^{-1}$ .

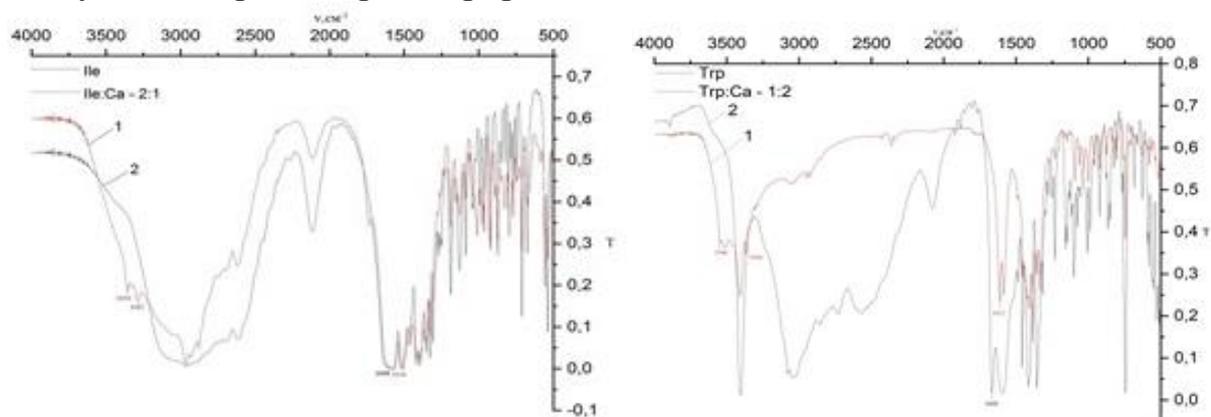


Рис. 1. ИК спектры: 1-Ile:  $\text{Ca}^{2+}$  соотношение 2:1; 2- Ile(АК);  
1-Trp:  $\text{Ca}^{2+}$  соотношение 1:2; 2-Trp (АК)

Морфология и форма частиц твердой фазы были изучены методом оптической микроскопии с использованием электронного микроскопа серии XSP-140, в качестве материала для исследования были использованы твердые фазы кальция с аминокислотами. Доказано образование комплексных соединений по типу “ион кальция (II) - аминокислота” в мольных соотношениях металл - аминокислота - 1:2; 2:1. Установлено наличие ковалентной связи, образованной по донорно-акцепторному механизму с неподелённой электронной парой атома азота аминокислот и иона кальция (II), и так же иона кальция (II) с карбоксил ионной группой аминокислот. Полученные данные о характерных типах координации аминокислот могут повысить достоверность прогноза строения соединений, которые являются малоизученными и предоставить новые возможности для совершенствования методов направленного синтеза комплексов заданной структуры и состава.

УДК: 678.067.5

Бондарь Александра Александровна

## ВЛИЯНИЕ СТРОЕНИЯ ТЕРМОРЕАКТИВНОГО СВЯЗУЮЩЕГО НА ХИМИЧЕСКУЮ СТОЙКОСТЬ СТЕКЛОПЛАСТИКА

Руководитель: Е.И. Лагуева

Тверской государственный технический университет, г. Тверь  
Кафедра химии и технологии полимеров

Исследования химической стойкости наполненных полимеров необходимо для понимания возможности использования в различных отраслях промышленности. Стеклонаполненные композиты отличаются малым весом и хорошими физико-механическими показателями, при этом стойкость к различным агрессивным средам напрямую зависит от используемого связующего. Смолы различны по химической природе и соотношению компонентов, что позволяет получать широкий ассортимент продукции по назначению и свойствам [1].

В работе рассмотрена химическая стойкость стеклопластиков, в которых в качестве полимерного связующего использованы термореактивные смолы различного характера (ортофталевая и изофталевая полиэфирные смолы, винилэфирная смола) и стеклянного волокнистого наполнителя.

Для испытаний изготовлены образцы стеклопластика (по 20 образцов на каждый вид связующего) стандартного размера 150x20x4мм, которые были помещены на 36 часов в среды: H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 25%, HCl 15%, HNO<sub>3</sub> 5%, NaOH 5%, NH<sub>4</sub>OH 25%, керосин, дистиллированная вода, CH<sub>3</sub>COOH (лед.), H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 25 %.

Образцы взвешивались на аналитических весах до и после погружения в растворы.

Результаты показывают, что во всех случаях наблюдалось увеличение массы образцов. В ледяной уксусной кислоте в образцах на основе изофталевой полиэфирной смолы появилась шероховатость поверхности, а в случае ортофталевой полиэфирной смолы – наблюдалось изменение структуры (вздутия, поры). Это говорит об ограничении применения стеклопластиков на основе указанных смол в агрессивной среде ледяной уксусной кислоты.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дьяконов Г.С. Химически стойкие стеклопластики как средство повышения безопасности и эффективности оборудования сернокислотных производств / Г.С. Дьяконов, Л.Э. Осипова, Э.Ш. Теляко // Вестник Казанского технологического университета. – 2014. – Т.17. – №23. – С. 305-311.

УДК: 665.941.1

Бородина Анастасия Максимовна

## **ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ pH СРЕДЫ НА ВЯЗКОСТЬ РАСТВОРОВ КСАНТАНОВОЙ КАМЕДИ**

Руководитель: И.И. Осовская

Санкт-Петербургский государственный университет  
промышленных технологий и дизайна

Высшая школа технологии и энергетики, г. Санкт-Петербург

Кафедра физической и коллоидной химии

Ксантановая камедь представляет собой полисахарид, главная цепь которого идентична целлюлозе и содержит анионные гидроксогруппы. Боковая цепь состоит из остатков маннозы, глюкоуриновой и катализированной пировиноградной кислот. Важным свойством ксантановой камеди является стабильность её растворов – отклик свойств на изменение кислотности/щелочности среды. В связи с этим, целью данного исследования является изучение влияния pH среды на вязкость растворов ксантановой камеди при её модификации. Материалы публикаций, экспериментальные данные, полученные нами ранее [1], показали, что свойства камеди и ее растворов во многом определяют широкое применение этого полимера в медицине, в косметологии, в пищевой промышленности. Влияние pH растворов на вязкость камедей проводили методом потенциометрического титрования. В работе определена изоэлектрическая точка (ИЭТ) для немодифицированного и модифицированного полимера, которая составила 7.2 и 3.6 соответственно. На графике зависимости вязкости растворов ксантановых камедей от pH среды видны несколько пиков, которые соответствуют минимальной и максимальной вязкости при разных pH. Такое изменение вязкости, а также наличие катионных и анионных групп в строении камеди характерно для полиамфолитов. Полученные результаты показали меньшее количество активных анионных групп в модифицированной камеди, что согласуется с работой, выполненной ранее – измерением поверхностной активности полимера. [1]. В работе показано, что расслоение растворов ксантановой камеди происходит при температуре 85-90 °С, это позволяет использовать ее в качестве связующего для получения композиционных материалов, производство которых требует высоких температур.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Влияние pH среды на вязкость и поверхностную активность модифицированных форм гуаровой камеди – материала для оболочек капсул. А.М. Бородина, А.П. Васильева / XXV Каргинские чтения: тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2019. – С. 101.

УДК: 648.7:541.6

Братасюк Никита Андреевич<sup>1</sup>

## СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ЭПОКСИУРЕТАНОВЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ, СОДЕРЖАЩИХ ГЕКСАГОНАЛЬНЫЙ НИТРИД БОРА

Руководитель: В.В. Зуев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Университет ИТМО

<sup>2</sup> Институт высокомолекулярных соединений РАН

Применение модификаторов и наполнителей позволяет направленно регулировать технологические и эксплуатационные свойства эпоксиаминных композиций. Но в большинстве исследований не уделяется достаточного внимания влиянию размера частиц и их поверхности на основные кинетические параметры отверждения и конечную структуру наполненных композиций. Для изучения влияния поверхностных свойств частиц наполнителя на их взаимодействие с полимерной матрицей и, как следствие, влияния характера внедрения наполнителей в полимерную матрицу на теплопроводность был выбран гексагональный нитрид бора (BN) и его модифицированное производное (mBN).

Изучение процесса отверждения эпоксиуретановых связующих в присутствии теплопроводных наполнителей проводили с помощью ДСК в динамическом и изотермическом режимах (рис.).

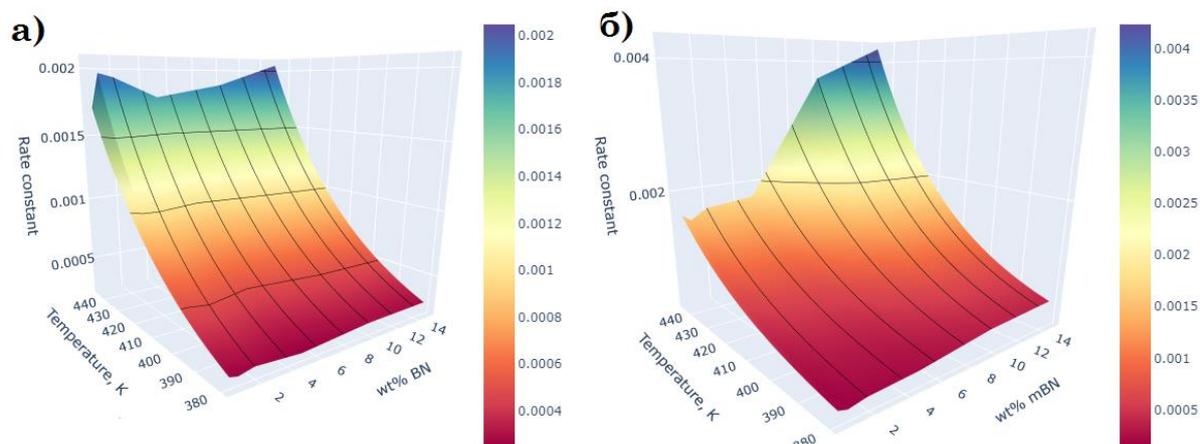


Рисунок: Константы скорости реакции отверждения для композиций с: а) BN, б) mBN

Для полученных композиций были определены термические свойства и ряд основных физико-механических характеристик. Как и ожидалось из данных кинетики, максимальное упрочнение и снижение хрупкости композиций наблюдалось при низких концентрациях наполнителя.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ  
в рамках научного проекта № 20-33-90006.*

УДК: 541.6

Брянцев Дмитрий Витальевич

## ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ В ИССЛЕДОВАНИИ КОРРЕЛЯЦИЙ СТРУКТУРА СВОЙСТВО АЛЬДЕГИДОВ

Руководитель: М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра физической химии

Целью данной работы является – установление количественных корреляций «структура – термодинамические свойства» в альдегидах.

В работе рассмотрены методы теории графов и линейной алгебры. В частности, для определения линейно независимых параметров расчетных схем через исходные экспериментальные данные. Также используются методы статистической обработки данных и методы регрессионного анализа, а найти наилучшие значения параметров позволяет метод наименьших квадратов.

Для достижения поставленной цели в работе были решены следующие задачи:

1) Проведена оценка состояния численных данных по термодинамические свойствам в рассматриваемых соединениях.

2) Проанализированы и выбраны для построения корреляций «структура–свойство» наиболее подходящие топологические индексы (ТИ). Дана теоретико-графовая интерпретация аддитивных схем.

Показано, что многие известные ТИ участвуют как числа параметров в конструировании таких схем.

3) По полученным формулам проведены численные расчёты термодинамических свойств выбранных соединений.

Рассчитанные величины согласуются с экспериментальными и позволяют предсказать в пределах ошибок опыта недостающие значения термодинамических свойств членов исследуемого ряда.

4) Проанализированы графические зависимости «Свойство – топологический индекс», «Свойство – номер изомера» и «Топологический индекс – номер изомера» и др., позволяющие графическим путём получать недостающие значения о свойствах ( $P$ ).

Показано, что в одних случаях наблюдается симбатное изменение термодинамических свойств и топологического индекса. Это свидетельствует о хорошей корреляции между  $P$  и ТИ. В других случаях такой корреляции нет. С увеличением числа изомеров корреляции между термодинамическими свойствами и ТИ усложняются, что необходимо учитывать при аналитическом изучении зависимостей «термодинамическое свойство– ТИ».

УДК 547

Буренина Анастасия Юрьевна

## ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ОРГАНИЧЕСКИХ ФОРСФАТОВ В КАЧЕСТВЕ ОГНЕЗАЩИТНЫХ ДОБАВОК

Руководитель: Н.В. Веролайнен

Тверской государственный университет  
Кафедра органической и биоорганической химии

Сложные эфиры ортофосфорной кислоты и спиртов, этоксиатов спиртов, этоксиатов алкилфенолов применяются в различных областях промышленности, но наибольший интерес представляет использование их в качестве огнезащитных материалов.

Отличительной особенностью органических фосфатов является их высокая огнестойкость. Температура воспламенения многих таких фосфатов выше  $600^{\circ}\text{C}$ , они медленно горят в пламени, не поддерживая горение и не распространяя пламя. Сложные эфиры ортофосфорной кислоты обладают достаточной термической и окислительной стабильностью, высокой смазочной способностью, хорошими вязкостно-температурными свойствами.

В работе получены сложные эфиры ортофосфорной кислоты на основе 1,4-бутандиола, глицерина, бутафоса К, оксифоса Б и безводного  $\text{P}_2\text{O}_5$  при температуре  $45^{\circ}\text{C}$  в течение 4-х часов. Для исследования огнезащитных свойств, органические сложные эфиры наносили на лист бумаги и поджигали. Установлено, что поверхность бумаги, обработанная эфирами на основе 1,4-бутандиола, глицерина и оксифоса осталась нетронута огнем, остальные полученные сложные эфиры ортофосфорной кислоты поддерживали горение.



Рис. Фотография поверхности бумаги со сложным эфиром ортофосфорной кислоты на основе 1,4-бутандиола после обработки огнем.

УДК 537.632

Васильев Алексей Денисович

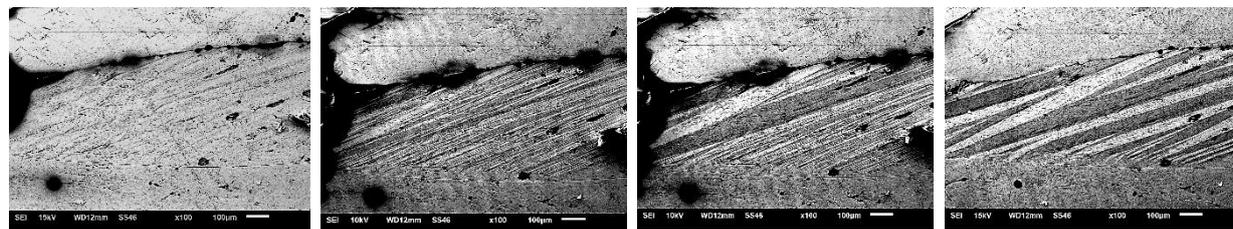
**МИКРОСТРУКТУРА СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА**

Руководитель: А.И. Иванова

Тверской государственный университет, Тверь  
Кафедра прикладной физики

Мартенситные превращения в сплавах Гейслера обладают свойством обратимо пластически деформироваться и восстанавливать исходную форму (эффект памяти формы). Особенностью этих сплавов являются термоупругие бездиффузионные низкотемпературные мартенситные превращения, заключающиеся в закономерной перестройке кристаллической решетки. Плоские полированные поверхности, подготовленные на образцах при температурах выше температуры мартенситно - аустенитного превращения, становятся рельефными после перехода в низкотемпературную фазу. Превращение из аустенита в мартенсит (прямое превращение) характеризуется температурой  $M_s$  появления зародышей мартенситной фазы в аустенитной матрице и температурой  $M_f$  завершения формирования мартенсита. При обратном превращении (мартенсит  $\rightarrow$  аустенит) эти температуры обозначаются как  $A_s$  и  $A_f$ . Между прямым и обратным мартенситным превращением наблюдается гистерезис, величина которого зависит от того, насколько сильно отличаются аустенитная и мартенситная фазы друг от друга и от того насколько велика собственная деформация при превращении.

В настоящей работе представлены результаты исследования микроструктуры сплавов состава  $Ni_{2,16}Mn_{0,84}Ga$ . Изменение структуры поверхности поликристалла  $Ni_{2,16}Mn_{0,84}Ga$  (скольжение межфазной границы, появление дефектов решетки - двойников) при последовательных циклах нагрева – охлаждения показаны на рисунке.



а

б

в

г

Рисунок. Прямой переход сплава  $Ni_{2,16}Mn_{0,84}Ga$   
(а –  $A_s=60^\circ C$ , б –  $A_f=40^\circ C$ , в –  $M_s=35^\circ C$ , г –  $M_f=15^\circ C$ )

В случае обратного (аустенитного) перехода наблюдается сдвиг температур фазовых превращений – температурный гистерезис.

УДК: 665.941.1

Васильева Анастасия Павловна

## ГИДРОФОБИЗАЦИЯ ГУАРОВОЙ КАМЕДИ

Руководитель: И.И. Осовская

Санкт-Петербургский государственный университет  
промышленных технологий и дизайна  
Высшая школа технологии и энергетики, г. Санкт-Петербург  
Кафедра физической и коллоидной химии

Особое место в классе растительных полимеров занимают различные камеди. Камеди относятся к гидрофильным полисахаридам, которые широко используются в качестве стабилизаторов, загустителей, гелеобразователей в различных областях промышленности [1]. Гидрофильность камеди ограничивает ее использование. Существует несколько методов превращения природных гидрофильных полимеров в гидрофобные: физические и химические. Целью данной работы является гидрофобизация гуаровой камеди путем ее химической модификации, осуществляемой заменой гидрофильных групп полимера введением гидрофобных групп. Для осуществления поставленной цели необходимо было решить следующие задачи. В ранее опубликованной работе [2] показано, что модификация гуаровой камеди уксусным ангидридом при массовом соотношении камеди к ангидриду 1:0,5 наблюдается снижение гидрофильных свойств гуаровой камеди, но недостаточное для полной гидрофобизации. В представленном исследовании для большей гидрофобизации модификацию камедей осуществляли пропионовым ангидридом при массовом соотношении камеди к ангидриду 1:2. Образование модифицированных форм камедей контролировали методом ИК-Фурье-спектроскопии. В работе исследовали набухание в воде и сорбцию паров воды при различных значениях относительных давлений паров воды. Экспериментальные данные показали полное отсутствие сорбции паров воды и незначительное набухание в жидкой воде. Следовательно, химически модифицированную камедь можно рекомендовать к применению в таких областях, как создание водонепроницаемых и паронепроницаемых материалов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lopes B.De M., Lessa V.L., Silva B.M. Xanthan gum: properties, production conditions, quality // Journal of Food and Nutrition Research. 2015. Vol. 54, N3. Pp. 185–194.
2. Влияние pH среды на вязкость и поверхностную активность модифицированных форм гуаровой камеди – материала для оболочек капсул. А.М. Бородина, А.П. Васильева / XXV Каргинские чтения: тезисы докладов. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2019. – С. 101.

УДК: 544.778.3

Ватаманюк Владимир Олегович

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАЗМЕРА ТВЕРДЫХ ЧАСТИЦ НАПОЛНИТЕЛЯ  
В СУСПЕНЗИЯХ МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ**

Руководители: П. М. Пахомов, А.И. Маркова

Тверской государственный университет, Тверь

Кафедра физической химии

В настоящее время дисперсные системы (эмульсии, суспензии, пористые материалы, ксерогели и др.) широко используются в различных отраслях народного хозяйства. Однако для изучения их строения и свойств часто используются дорогостоящие приборы, требующие сложной и длительной процедуры обработки результатов. Нами предлагается простой, доступный и эффективный спектроскопический метод, основанный на анализе упруго рассеянного света от частиц наполнителя в матрице.

Целью настоящей работы являлось выяснение возможности использования спектроскопического метода во всем оптическом диапазоне (УФ, видимая и ИК области спектра) для исследования морфологии суспензий, как важных представителей дисперсных систем. В качестве образцов исследования были взяты суспензии (вазелиновое масло, наполненное  $Al_2O_3$  и слюдой).

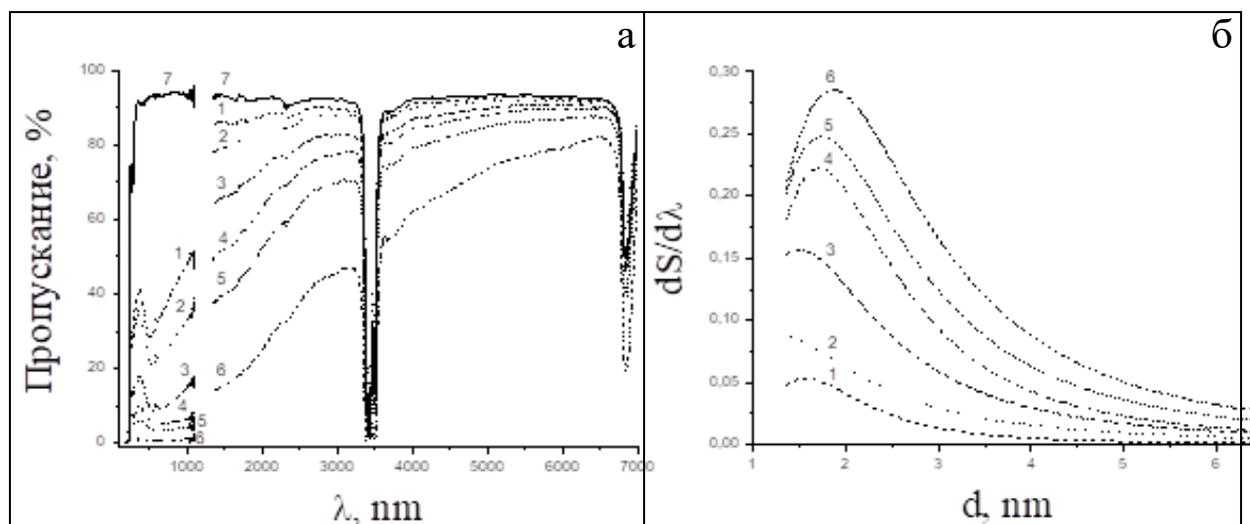


Рис. Совмещенные УФ+ИК (а) спектры системы ВМ/слюда с концентрацией наполнителя 4 (1), 10 (2), 20 (3), 30 (4), 40 (5), 50% (6) и вазелиновое масло (7). Кривая распределения частиц по размерам, полученная на основе спектроскопических данных (а)

Показано, что спектроскопический подход, предложенный для оценки размеров и распределения частиц в жидкой матрице, может быть с успехом использован для изучения морфологии суспензий. Полученные данные демонстрируют возможность использования спектроскопического подхода в качестве дополнительного, простого и эффективного метода для изучения морфологии эмульсий и суспензий.

*Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования ТвГУ.*

УДК: 661.185.1

Веролайнен Виолетта Андреевна

## **ПОЛУЧЕНИЕ ЭМУЛЬСИЙ ОЛИВКОВОГО МАСЛА В РАСТВОРАХ НЕИОНОГЕННЫХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ**

Руководитель: С.А. Темникова, доцент, к.х.н.

Тверской государственный университет  
Кафедра органической и биоорганической химии

Лиофобные дисперсные системы, представляющие эмульсии типа масло/вода обладают рядом преимуществ, по сравнению с эмульсиями вода/масло и используются для создания современной косметологической продукции. Эмульсионные крема имеют эффективные увлажняющие, барьерные свойства, являются водостойкими, позволяют объединить полярные и неполярные фазы в одном продукте. Однако до сих пор не существует стандартных методик получения таких эмульсий, а низкоэнергетические способы являются экспериментальными.

Эмульсии типа масло/вода могут быть стабилизированы неионогенными поверхностно-активными веществами, которые имеют низкие значения ГЛБ и обладают высокой растворимостью в фазе масла. Однако, из литературы известно, что для получения более устойчивой эмульсии использование комбинации ПАВ, одного, более гидрофильного, другого, более гидрофобного, оказывается эффективней.

Среди методов подбора ПАВ в качестве стабилизатора и эмульгатора для получения эмульсий существует метод определения температуры инверсии фаз. Принцип метода основан, на способности НПАВ с полиоксиэтиленовыми цепями изменять в зависимости от изменения температуры сродство к маслу и воде.

В качестве модели для получения обратных эмульсий в работе было выбрано оливковое масло холодного отжима, синтанол ОС-20, сорбитан моностеарат span 60, а также комбинации данных ПАВ. Оливковое масло ценно своими увлажняющими, регенерирующими и смягчающими свойствами. Выбор неионогенных поверхностно-активных веществ был сделан благодаря их мягким дерматологическим свойствам.

Обратные эмульсии получали методом определения температуры инверсии фаз. Обращение фаз определяли по скачку удельной электропроводности, измеренную кондуктометром Mettler Toledo SG7.

Таким образом методом температурной инверсии фаз были получены обратные эмульсии оливкового масла в водных растворах ОС-20 со средними точками инверсии фаз: 44°C и 48°C. Эмульсии, полученные с комбинацией ОС-20 и Span 60 снижают точки инверсии фаз до 32°C и 38°C, что доказывает эффективность применения их смеси.

УДК: 539.19

Веселов Алексей Дмитриевич

## ОБ УСЛОВИЯХ СТАБИЛЬНОСТИ/НЕСТАБИЛЬНОСТИ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУР ЯДРО-ОБОЛОЧКА

Руководитель: Н.Ю. Сдобняков

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра общей физики

В [1] была выдвинута и частично подтверждена гипотеза о тесной взаимосвязи между степенью стабильности/нестабильности наноструктур А(ядро)@В(оболочка) и спонтанной поверхностной сегрегацией одного из компонентов в бинарных наночастицах А-В с первоначально равномерным распределением компонентов. Было показано в [1], что в бинарных наночастицах Au-Co должна наблюдаться поверхностная сегрегация Au как низкоэнергетического по сравнению с Co компонента, характеризующегося более низкими значениями энергии связи и поверхностного натяжения. Однако в [2] при моделировании методом Монте-Карло наноструктур Au@Co и Co@Au меньшего размера наблюдалась поверхностная сегрегация атомов Co, а не Au (см. рис. 1).

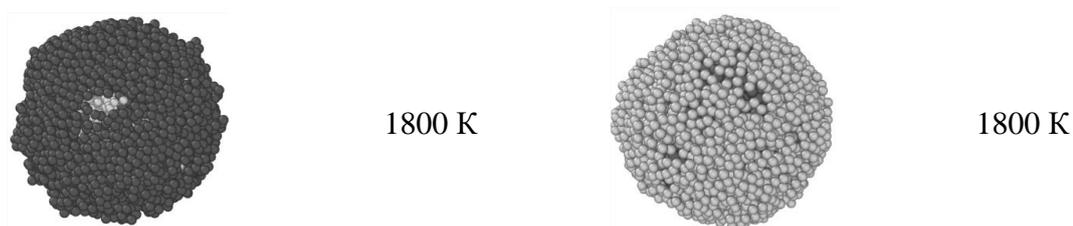


Рис. 1. Конфигурации системы  $Co_{2500}/Au_{2500}$ , полученные в процессе моделирования методом Монте-Карло. Левый столбец отвечает случаю  $Co_{2500}$ (ядро)/ $Au_{2500}$ (оболочка), правый –  $Au_{2500}$ (ядро)/ $Co_{2500}$ (оболочка). Атомы Au изображены темными шарами.

На данный момент трудно сделать окончательное заключение о том, насколько эти результаты соответствуют реальным наночастицам Au-Co. Однако, так или иначе, эти результаты также представляют интерес, поскольку на примере адекватной модельной системы и адекватной модели межатомного взаимодействия они демонстрируют возможность поверхностной сегрегации высокоэнергетического компонента и, соответственно, более высокой стабильности наноструктуры с оболочкой, представленной высокоэнергетическим компонентом.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Samsonov V.M., Talyzin I.V., Kartoshkin A.Yu., Vasilyev S.A. // Applied Nanoscience. 2019. V. 9. I. 1. P. 119-133.
2. Сдобняков Н.Ю., Самсонов В.М., Колосов А.Ю. и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2019. Вып. 11. С. 520-534.

УДК: 661.1

Веселова Анна Владимировна

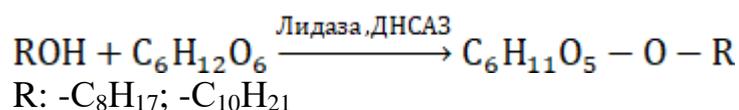
## СИНТЕЗ ОКТИЛ- И ДЕЦИЛПОЛИГЛИКОЗИДОВ ФЕРМЕНТАТИВНЫМ МЕТОДОМ

Руководитель: Н.В. Веролайнен

Тверской государственный университет  
Кафедра органической и биоорганической химии

Алкилполигликозиды (АПГ) являются простыми эфирами, которые образованы длинноцепочечными спиртами и фрагментами углеводов (мальтозы, глюкозы и др.) [1]. Алкилполигликозиды имеют огромное значение в косметической, пищевой, фармацевтической промышленности, производстве моющих средств. Их используют, как поверхностно-активные вещества или гидротропы на биологической основе. В зависимости от природы алкилового спирта, алкилполигликозиды являются сырьем при производстве более сложных химических веществ.

Среди известных способов получения алкилполигликозидов в работе выбран наиболее эффективный ферментативный метод. Синтезы осуществлялись по схеме:



Полученные соединения представляют собой светло-желтую вязкую жидкость, без запаха. Очищенные октил- и децилполигликозиды плохо растворяются в этаноле, не растворяются в диэтиловом эфире. Выход продуктов составил 70 %. Строение и состав полученных соединений были подтверждены данными ИК-спектроскопии.

С помощью ферментативных реакций по сравнению с другими методами получения были достигнуты большие выходы алкилполигликозидов, что объясняется образованием в системе мицелл, которые сохраняют конечный продукт. Поэтому, можно сделать вывод о том, что данный метод получения АПГ является более эффективным и экономически выгодным.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Прохорова Г.В. Коллоидно-химические свойства смесей анионных ПАВ с алкилполигликозидами.: дис. ... на соискание ученой степени канд. хим. наук. - М., 2012. - 116 с.

УДК: 547.735; 544.18

Войташ Анна Александровна

**МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ 2-МЕТИЛ-2,3,4,5-  
ТЕТРАГИДРО-1Н-[1]БЕНЗОТИЕНО[2,3-с]АЗЕПИНА**

Руководители: А.В. Муратов, А.Б. Ересько

Государственное учреждение

«Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко», г. Донецк  
Отдел химии биологически активных соединений

В работе исследовано строение гидрохлорида 2-метил-2,3,4,5-тетрагидро-1Н-[1]бензотиено[2,3-с]азепина с различной ориентацией азепинового цикла с использованием методов молекулярного моделирования. Первоначальный конформационный анализ гидрохлорида 2-метил-2,3,4,5-тетрагидро-1Н-[1]бензотиено[2,3-с]азепина выполнен средствами программного пакета Marvin, в результате выявлены структуры двух конформеров с наименьшей энергией, отличающиеся взаимной ориентацией бензотиенового и азепинового фрагментов. Дальнейшая оптимизация их молекулярной геометрии выполнена методом B3LYP/6-31G(d,p) с учетом неспецифической сольватации диметилсульфоксидом в программном комплексе GAUSSIAN09.

Для конформеров К1 и К2 гидрохлорида исследуемого соединения выполнена оценка химических сдвигов ядер  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ . Рассчитанные химические сдвиги ядер  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  конформеров К1 и К2 хорошо согласуются с экспериментальными значениями, полученными в растворе ДМСО- $d_6$ . Для исследуемого соединения обнаружены линейные корреляции между экспериментальными и рассчитанными (на примере конформера К1) значениями химических сдвигов ядер  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  (рис.1), характеризующиеся высоким коэффициентом корреляции (0,993 – 0,995).

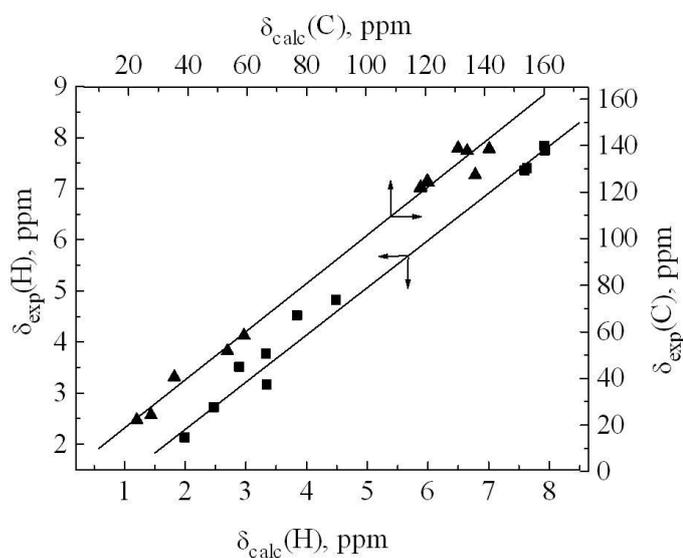


Рис. 1.: Линейные корреляции между экспериментальными и рассчитанными (для конформера К1) химическими сдвигами ядер  $^1\text{H}$  (■) и  $^{13}\text{C}$  (▲) гидрохлорида 2-метил-2,3,4,5-тетрагидро-1Н-[1]бензотиено-[2,3-с]азепина

УДК: 615.322

Волкова Валерия Максимовна

## ОЦЕНКА ЭФФЕКТА АНТРОПОГЕННЫХ ФАКТОРОВ НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ЛИСТЬЕВ КЛЁНА

Руководитель: С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

На сегодняшний день проблема загрязнения окружающей среды – один из важнейших вопросов не только в нашей стране, но и во всём мире. Многочисленными биохимическими и морфологическими исследованиями установлено, что клён хорошо приспособлен к городским условиям и может выступать в роли биоиндикатора антропогенного воздействия.

Клён содержит большое количество биоактивных соединений, таких как алкалоиды, жирные кислоты, витамины Е, В, дубильные вещества, имеющие большую ценность в медицине, сельском хозяйстве и пищевой промышленности.

Цель данной работы – изучение эффекта антропогенных факторов на синтез наночастиц серебра (НЧС) в водных экстрактах клена методом УФ спектроскопии. Объектом исследования являлись листья клёна, собранные 22 - 26 сентября 2020 года в четырёх районах города Твери (парк Победы, Городской сад, ул. А. Попова, ул. Завидова).

В УФ спектрах водных экстрактов, высушенных образцов обнаружены полосы поглощения разной интенсивности с максимумами поглощения ~240, ~285, ~330 нм, которые соответствуют биологически активным веществам (фенольным соединениям) – простым фенолам, оксибензойным кислотам, флавонам, флаванонам, катехинам и др. Это свидетельствует о влиянии антропогенного фактора на химический состав исследуемых образцов. Добавление раствора нитрата серебра ( $\text{AgNO}_3$ ) к водным экстрактам листьев приводит к существенным изменениям электронных спектров образцов – появлению широкой полосы поглощения с максимумом ~ 420 – 430 нм, что говорит о присутствии наночастиц серебра. Таким образом, методом УФ спектроскопии можно анализировать биоактивные вещества в водных экстрактах листьев клёна, образование наночастиц серебра под их воздействием для оценки эффекта антропогенных факторов на химический состав исследуемых образцов.

*Данная работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии  
центра коллективного пользования ТвГУ*

УДК: 541.183.1

Волчкова Елена Сергеевна

## СИНТЕЗ И СВОЙСТВА L-ИЗОМЕРА N-(КАРБОКСИМЕТИЛ)АСПАРАГИНОВОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель: В.М. Никольский

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Синтезирован L-изомер N-(карбоксиметил)аспарагиновой кислоты (L-КМАК) и установлено, что в твердом состоянии этот комплексон имеет бетаиновую структуру.

В составе L-КМАК атом азота имеет высокую основность ( $pK_4 = 10.42$ ), что объясняется образованием цикла между ионизированной  $\alpha$ -карбоксылной группой и протонированной аминогруппой с включением в этот цикл молекулы воды за счет водородных связей. Этот вывод подтверждается и сравнением ИК-спектров оптического изомера комплексона L-КМАК с L-изомером исходной L-аспарагиновой аминокислоты [1].

В данной работе на круговом поляриметре СМ-3 проводили измерение удельного вращения плоскости поляризации L-КМАК в сравнении с таким же параметром L-аспарагиновой аминокислоты.

Величину удельного вращения  $[\alpha]$  рассчитывали по формуле [2]:

$$[\alpha] = \frac{\alpha \cdot 100}{l \cdot C} ;$$

где  $\alpha$  – измеренный угол вращения, градусы;

$l$  – толщина слоя, дм;

$C$  – концентрация раствора, г вещества на 100 мл раствора.

Установленный угол вращения плоскости поляризации L-КМАК составляет  $+24^\circ$ , а L-аспарагиновой аминокислоты  $+20^\circ$ .

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Никольский В.М., Биберина Е.С., Волчкова Е.С., Новикова Л.А. Спектроскопия оптических изомеров аминокислот и их производных / XV Междунар. конф. «Спектроскопия координационных соединений»: тез. докл., Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2018, С. 280-281.
2. Василенко И.А. Оптические изомеры в фармацевтике / И.А. Василенко, М.В. Лебедева, В.А. Литров // Разработка и регистрация лекарственных средств. – 2015. – № 1 (10). – С. 92-104.

УДК: 538.956

Галайко Александр Сергеевич

## ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРОВАНИЯ БАРИЕМ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕРАМИКИ KNN

Руководители: Е.В. Барабанова О.Л. Сероштанов

Тверской государственный университет  
Кафедра прикладной физики

Для получения функциональных материалов с заданными свойствами (в частности, сегнетоэлектрической керамики) применяют различные способы модификации состава.

В данной работе проводилось легирование керамики ниобата калия натрия KNN ионами бария Ва, который замещал ионы калия и натрия в количестве 10 % (KNBN). Керамика была получена по традиционной керамической технологии. При этом изначально синтезировались ниобаты калия и натрия последовательно при 650 и 700 °С, а затем спекалась керамика KNN при 1100 °С. Барий добавлялся перед заключительным спеканием. Для исследуемой керамики проводились измерения тангенса угла диэлектрических потерь и ёмкости образцов на фазочувствительном измерителе Вектор-175 при температурах 25-450 °С и на частотах  $1-35 \cdot 10^6$  Гц.

Как видно на рисунке 1 на зависимости  $\epsilon'(T)$  для керамики KNN наблюдается два максимума при 220 и 420 °С, что согласно литературным данным соответствует фазовым переходам из ромбоэдрической фазы в тетрагональную и далее в кубическую. При легировании Ва основной максимум, соответствующий сегнетоэлектрическому фазовому переходу, размывается и его температура зависит от частоты поля. Стоит отметить, что низкотемпературный максимум в этом случае не наблюдается, а при температурах ниже 150 °С диэлектрическая проницаемость уменьшается с ростом температуры. Это можно объяснить присутствием в керамике объемного заряда, формирующегося за счет неспаренных электронов бария.

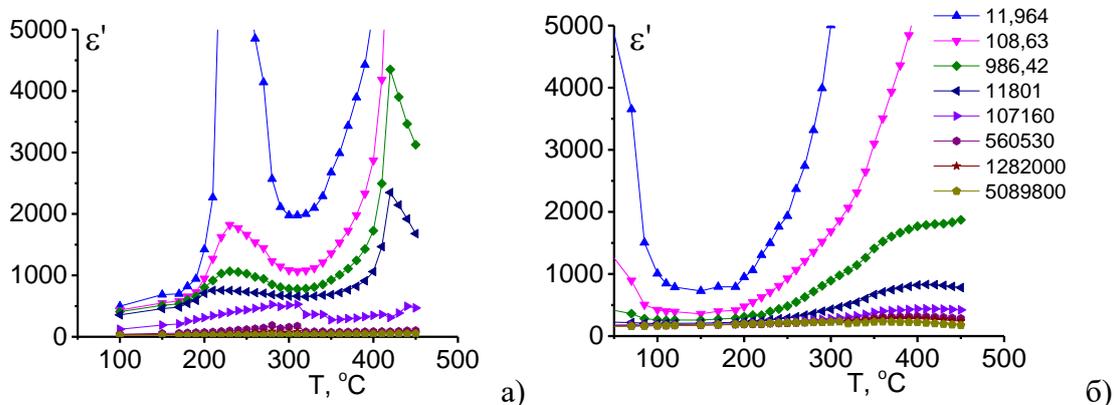


Рисунок 1. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости при различных температурах для KNN (а) и KNBN (б)

УДК: 543.4

Гамрекели Юлия Алексеевна

## АНАЛИЗ СОДЕРЖАНИЯ НИКОТИНОВОЙ КИСЛОТЫ В СЫВОРОТКЕ ДЛЯ ЛИЦА И КОНЦЕНТРАТЕ ДЛЯ ВОЛОС

Руководитель: В.М. Никольский

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Никотиновая кислота обладает весьма интересными фармацевтическими свойствами, т.к. является представителем важной группы антигельминтных препаратов и витаминов [1]. Эти соединения полезны для организма человека и участвуют в ряде важных биохимических процессов [2]. Так, никотиновая кислота превращается в никотиनाмидадениннуклеотид, который служит промежуточным продуктом в процессах двухэлектронного переноса в организме [3].

Прямая спектрофотометрия может быть использована для определения содержания никотиновой кислоты в субстанциях [4]. В нашей работе содержание никотиновой кислоты определяли фотометрическим методом при 262 нм, соответствующей максимальной адсорбции света.

Таблица 1.

Содержание витамина в косметических объектах

	Норма	«Novosvit Ampoule Beaute skin»	«Золотой шелк»
Никотиновая кислота, г/л	50	49,8±1	50,1±1

Анализ содержания никотиновой кислоты в косметических объектах показал, что в анализируемых образцах её присутствие отвечает норме.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Vargova Z., Zeleoak V., Cisaova I., Gyoryova K. // Ther mochim. Acta. 2004. V. 423. P. 149.
2. Textbook of Biochemistry with Clinical Correlations. J.L. York in: Delvin T.M. (Ed.). New York: Wiley, 1992. P. 135.
3. Kiec-Kononowicz K., Szymaska E. // II Farmaco. 2003. V. 57. P. 909.
4. Fabio R. P., Boaventura F. A multicommuted flow system for sequential spectrophotometric determination of hydrosoluble vitamins in pharmaceutical preparations // Anal. Chem. - 2003. - № 19. - P. 191-200.

УДК: 615.322

Гешко Владимир Владимирович

## **ЗЕЛЕНый СИНТЕЗ НАНОЧИСТИЦ СЕРЕБРА С ПОМОЩЬЮ ВОДНЫХ ЭКСТРАКТОВ ДУБА**

Руководитель: С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

В настоящий момент наночастицы серебра (НЧС) привлекают повышенное внимание исследователей по причине их экстраординарной способности подавлять рост патогенных микроорганизмов, а также из-за эффекта привыкания к антибиотикам. Именно благодаря этим свойствам НЧС находят применение в различных областях, таких как биомедицина, адресная доставка лекарств, обработка воды, сельское хозяйство и т.д. НЧС можно синтезировать с помощью различных физико-химических методов – химическое и фотохимическое восстановление, метод лазерной абляции и др. Эти методы дают эффективный выход, но сопряжены с использованием токсичных реагентов и высокими энергозатратами. В настоящий момент делаются попытки использовать для синтеза НЧС биоактивные вещества различных растений, которые при этом выступают как восстанавливающие и стабилизирующие НЧ агенты.

Цель данной работы – получение наночастиц серебра с помощью водных экстрактов листьев дуба и их анализ методом УФ спектроскопии. Листья дуба были собраны в пяти разных районах г. Твери (Городской парк, колледж им. Коняева, Комсомольский проспект, бульвар Гусева, Октябрьский проспект). НЧС получили путем восстановления нитрата серебра ( $\text{AgNO}_3$ ), в качестве восстановителя использовали водный экстракт листьев дуба. Экстракты после добавления  $\text{AgNO}_3$  хранились в темноте. Электронные спектры образцов были получены на спектрометре «Evolution Array» фирмы «Thermo Scientific».

Установлено, что наночастицам серебра, образованным в водных экстрактах образцов из разных мест сбора, соответствуют полосы поглощения различной интенсивности с максимумами в диапазоне ~ 410 – 440 нм. Таким образом, размер и концентрация НЧС, формирующихся под воздействием биоактивных веществ экстрактов дуба, определяются местом произрастания дерева, т.е. обстановкой окружающей среды.

*Данная работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии  
центра коллективного пользования ТвГУ*

УДК: 546.05

Головачев Андрей Алексеевич

## **ПОЛУЧЕНИЕ КОНЦЕНТРАТОВ МЕТАЛЛОВ ПРИ ПЕРЕРАБОТКЕ УГОЛЬНЫХ ОТХОДОВ КУЗБАССА**

Руководитель: Е.В. Черкасова

Кузбасский государственный технический университет  
имени Т.Ф. Горбачева, г. Кемерово

Кафедра химии, технологии неорганических веществ и наноматериалов

В работе рассмотрена методика получения редкометалльных концентратов из золошлаковых отходов путем азотнокислого выщелачивания с дальнейшим осаждением оксалатов или гидроксидов редкоземельных элементов, а также флотоэкстракционного обогащения золошлаков.

При извлечении химическими реагентами золу углей обрабатывали 2,5 М азотной кислотой, образующийся гель ортокремниевой кислоты и силикатов удаляли промывкой и фильтрацией. Полученную вытяжку нейтрализовали раствором аммиака до pH 5, в результате выпадал бурый осадок Fe(OH)<sub>3</sub>. После фильтрования осадка pH вытяжки доводили до 8,5 для совместного осаждения гидроксидов редкоземельных элементов и алюминия. Затем гидроксиды снова растворяли в азотной кислоте и проводили переосаждение редкоземельных металлов щавелевой кислотой при pH 1 [1]. Полученные вещества были высушены на воздухе.

Ионная флотация была проведена в лабораторной флотомашине ФЛ-240 при pH 7,5-8,5. Для создания органической фазы использовался изооктиловый спирт. Соотношение органической и водной фаз составляло от 1:20 до 1:60. В качестве ионоселективного собирателя и ПАВ наибольшую эффективность показал додецилсульфат натрия, т.к. он образует с редкоземельными металлами устойчивые гидрофобные комплексы, которые можно извлечь из пенных продуктов [2].

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Таскин А.В. Химико-технологические решения комплексной переработки золошлаковых отходов промышленности: дис. канд. хим. наук: 03.02.08. Владивосток.: ФГАОУ ВО «Дальневосточный федеральный университет». 2018, 208 с.
2. Джевага Н.В. Термодинамическое описание извлечения и разделения редкоземельных элементов методами ионной флотации и экстракции в виде додецилсульфатов дис. канд. хим. наук: 02.00.04. СПб.: Санкт-Петербургский государственный горный университет. 2011, 161 с.

УДК: 678.7:541.6

Горбачев Станислав Александрович

**СИНТЕЗ И ФАЗОВОЕ ПОВЕДЕНИЕ  
ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ДИМЕРОВ  
НА ОСНОВЕ ОКСИАЛКИЛ- И ЦИАНОБИФЕНИЛОВ**

Руководитель: В.В. Зуев

Национальный Университет ИТМО,  
г. Санкт-Петербург

Развитие оптоэлектронной техники, в частности жидкокристаллических (ЖК) дисплеев, требует понимания структурных факторов, определяющих температурный интервал существования, фазовое поведение, диэлектрические свойства и стабильность компонентов, используемых при их производстве. Цианобифенил является тем структурным элементом, с наличием которого связан первоначальный прогресс в развитии коммерческих ЖК материалов. Уретановый фрагмент позволяет ввести в потенциально ЖК соединения элемент, обеспечивающий формирование межцепных водородных связей, что позволяет существенно стабилизировать ЖК состояние, обогатить его фазовую природу. Синтез димеров в соответствии с теоретическим рассмотрением Flory, позволяет на индивидуальных соединениях моделировать поведение полимерных систем.

В данной работе был синтезирован набор замещенных 4-оксицианобифенилов с различной длиной алкиленовой части и набор димеров на основе этих соединений, связанных гексаметилендиизоцианатом. Полученные соединения были исследованы методами ИК и ЯМР спектроскопии, поляризационной оптической микроскопии. Показано, что присутствие уретановых групп в димерах приводит к формированию развитой сетки межмолекулярных водородных связей (их доля достигает 80% по сравнению с примерно 25% в низкомолекулярных аналогах). Подобная ситуация приводит к получению высокоплавких систем (с температурами плавления более 280°C), что препятствует формированию стабильной ЖК фазы. В то же время низкомолекулярные аналоги являются потенциально смектогенными (формируют структуру смектика С), что отличает их от традиционных производных цианобифенилов, которые являются нематогенными. Показано, что формирование сетки межмолекулярных водородных связей является определяющим фактором в их фазовом поведении, определяющим появление смектической ЖК фазы и ее термическую стабильность.

УДК: 635.21

Давлатов Илохи Умедович

## **ВЛИЯНИЕ НЕКОРНЕВЫХ ПОДКОРМОК КОМПЛЕКСНЫМИ УДОБРЕНИЯМИ НА ПРОДУКТИВНОСТЬ СОРТОВ КАРТОФЕЛЯ В УСЛОВИЯХ ВЕРХНЕВОЛЖЬЯ**

Руководители: М.Н. Павлов

Тверская государственная сельскохозяйственная академия  
Кафедра агрохимии и земледелия

В работе исследуются особенности формирования урожайности 4 сортов картофеля (Коломба, Королева Анна, Ред Скарлетт и Гала) при применении некорневых подкормок различными комплексными макро-микроудобрениями: контроль (без обработки); Акварин 5 (2 кг/га); Микромакроэлементный комплекс – разбавленный (раствор) (223 л/га); Микромакроэлементный комплекс – концентрированный (раствор) (223 л/га).

Исследования выполнили в 2020 году двухфакторном полевом опыте на опытном поле Тверской ГСХА. Почва опытного участка дерново - среднеподзолистая остаточного карбонатная глееватая на морене легкоуглинистая по гранулометрическому составу, хорошо окультуренная.

В результате выявлено, что меньшей густотой стояния (24,0 тыс.га) перед уборкой отличался сорт Коломба. У него отмечена также наименьшая общая выживаемость (50,3 %). Лучшими эти показатели были у сорта Ред Скарлетт – 27,4 тыс./га и 57,5 %. Положительное влияние на густоту стояния и общую выживаемость оказали некорневые подкормки различными препаратами. В среднем по сортам большее увеличение густоты стояния наблюдалось при обработке растений разбавленным ММК (на 2,2 тыс./га). При этом общая выживаемость повышалась на 4,3 %.

Влияние некорневой подкормки на урожайность клубней проявилось неодинаково у разных сортов. Так, у сортов Коломба и Гала наибольшую клубневую продуктивность обеспечил концентрированный ММК, у сорта Королева Анна – препарат Акварин 5, а у сорта Ред Скарлетт разбавленный и концентрированный ММК. В среднем по сортам наибольшую урожайность обеспечил концентрированный ММК (прибавка к контролю 7,6 т/га). По общему сбору клубней с гектара преимущество имел сорт Ред Скарлетт, который обеспечил в среднем по вариантам 46,1 т/га клубней (прибавка к сорту Коломба 10,8 т/га).

УДК: 615.322

Демченко Софья Дмитриевна

**ВЛИЯНИЕ ПРОМЫШЛЕННЫХ ЗАГРЯЗНЕНИЙ  
НА СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА  
В ВОДНЫХ ЭКСТРАКТАХ РЯБИНЫ ОБЫКНОВЕННОЙ**

Руководитель: С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

В настоящий момент наблюдается постоянное увеличение токсичных выбросов в атмосферу, что влияет на загрязнение почвы и воды. Растительный мир испытывает воздействие этих выбросов напрямую, поскольку поглощает токсичные вещества через листья и корневую систему. При этом многие растения используются для изготовления лекарственных препаратов, поэтому изучение влияния экологической обстановки на химический состав растений актуально. Цель данной работы - исследование влияния различных поллютантов на химический состав листьев рябины обыкновенной (*Sorbus aucuparia* L.) и на скорость образования наночастиц серебра (НЧС). Рябина обыкновенная широко используется в медицине благодаря высокому содержанию биоактивных веществ (антиоксидантов, антоцианов и др.).

Образцы листьев рябины для исследования были собраны в фазу зрелых плодов в г. Твери в местах с разной антропогенной нагрузкой (б-р Гусева, б-р Ногина, с. Константиновка, СНТ «Светлый», ул. Ипподромная, Морозовские казармы). В результате изучения водных и спиртовых экстрактов листьев с помощью УФ спектроскопии было установлено, что содержание биологически активных веществ в образцах варьируется в широких пределах. Обнаружено, что количество НЧС, образовавшихся в водных экстрактах рябины после добавления нитрата серебра, находится в прямой зависимости от содержания в исследуемых образцах фенольных соединений различной природы (флавоноидов, фенолоксилов и т.д.). Таким образом, полученные результаты подтверждают зависимость химического состава листьев рябины от влияния различных поллютантов (автотранспорт, промышленные выбросы и др.), т.е. фактически от мест произрастания.

*Данная работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии  
центра коллективного пользования ТвГУ.*

УДК: 537.632

Деревцова Евгения Вячеславовна

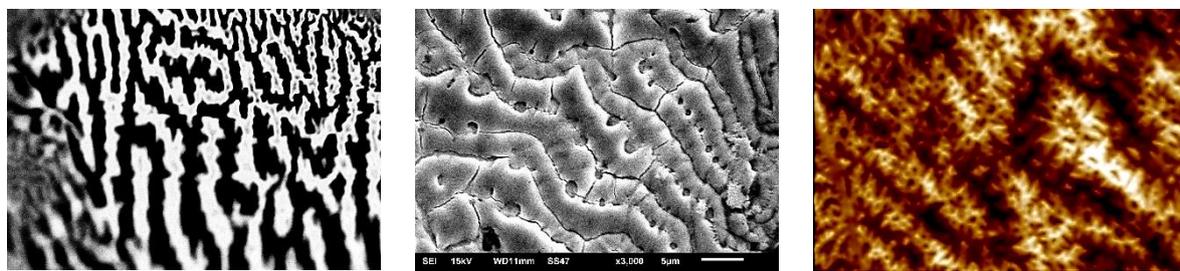
**МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ  
СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА**

Руководитель: А.И. Иванова

Тверской государственный университет, Тверь  
Кафедра прикладной физики

Магнитные сплавы Гейслера  $Ni_2MnX$  ( $X = Al, Ga, In, Sn, Sb$ ), обладают свойствами гигантской деформации, сверхпластичности, гигантского магнитосопротивления, магнитокалорического эффекта, наблюдаются в ферромагнитной области соответствующих фаз и связаны с протекающими в них структурными фазовыми переходами [1]. Трудности выявления магнитной доменной структуры в сплавах с памятью формы связано с наличием мартенситного рельефа в низкотемпературной фазе, невысокими значениями керровских констант, с оптической анизотропией сплавов.

В настоящей работе представлены результаты визуализации магнитных доменов поликристаллических сплавов Гейслера  $Ni_{2,16}Mn_{0,81}Fe_{0,05}Ga$  и монокристаллов  $Ni_{2,18}Mn_{0,82}Ga$  методами магнито-оптического эффекта Керра, магнитно-силовой микроскопии и способа, сочетающего сканирующую электронную микроскопию с методом порошковых осадков [2].

Рисунок: Доменная структура сплава  $Ni_{2,16}Mn_{0,84}Ga$ 

На рисунке представлены изображения полосовых доменов и, замыкающих клиновидных доменов, полученных тремя способами. В работе приведены результаты экспериментальных наблюдений доменов несколькими методами и их обсуждение.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Гречишкин Р.М., Иванова А.И., Барабанова Е.В. Магнитные свойства и доменная структура сплавов Гейслера: учеб пособие. Тверь: Твер. гос. ун-т. 2016. 75 с.
2. A.I. Ivanova, E.M. Semenova, O.V., Zhdanova at al. Colloid-SEM method for the investigation of magnetic domain structures // Micron 137 (2020) 102899.

УДК: 544.723.2

Десяцкова Анастасия Михайловна

## ТЕРМОДИНАМИКА НАБУХАНИЯ ФЛЕКСОФОРМ ФИРМЫ ЖЕТ В НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

Руководитель: В.Ю. Конюхов

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева  
Кафедра физической химии

Фотополимеры, из которых изготавливаются флексографские формы, в ходе эксплуатации последних взаимодействуют с растворителями: собственно компонентами красок, используемых в печати, и промывными растворами. При таком контакте фотополимеры поглощают различные низкомолекулярные жидкости, т. е. в некоторой степени набухают. В результате набухания меняются эластические свойства форм, что приводит к снижению качества печатной продукции. В связи с этим представляло интерес изучить термодинамические характеристики взаимодействия готовых флексографских форм с различными низкомолекулярными жидкостями.

В ходе работы методом обращённой газовой хроматографии были получены экспериментальные данные взаимодействия фотополимера с некоторыми растворителями. Видно, что наиболее предпочтительно применение красок и смывочных растворов на основе изопропанола, так как он слабо взаимодействует с фотополимером, что видно по значениям критерия Флори-Хаггинса и значениям энергии Гиббса смешения.

Таблица 1:  $G^M$ ,  $H^M$ ,  $S^M$  для некоторых растворителей при 303 К

Растворитель	$G^M$ , Дж/моль	$H^M$ , Дж/моль	$S^M$ , Дж/моль
Изопропанол	1325	1543	-4,320
Ацетон	-1900	1648	6,340
Гексан	-3174	490,0	10,470
Гептан	-3067	-242,0	10,110
Этилацетат	-2782	520,0	9,200
Бутилацетат	-5797	-520,0	18,20

Таблица 2: Критерий Флори-Хаггинса для некоторых растворителей при 303 К

Растворитель	Критерий Флори-Хаггинса
Изопропанол	3,110
Ацетон	1,970
Гексан	0,910
Гептан	0,840
Этилацетат	1,340
Бутилацетат	- 0,050

УДК: 541.49:581.1

Дмитриева Марина Юрьевна

## **ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ БОРОСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ НА МОРКОВИ**

Руководитель: О.В. Шилова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра агрохимии и земледелия

В пределах Тверской области ощущается дефицит бора не только в почвах, но и в сельскохозяйственной продукции. Для решения указанной проблемы необходимо применять биологически активные соединения (например, растворы боросодержащих хелатных комплексов с эффективными лигандами). В связи с этим целью проводимых исследований было сравнение эффективности растворов борной кислоты, боратного комплекса на основе ЭДДЯК (этилендиаминдиантарной кислоты) на разных фонах питания растений на свойства дерново-подзолистой почвы и урожайность моркови сорта «Самсон».

Результаты исследований показали, что применение растворов биологически активных соединений как на неудобренном, так и на удобренном фонах питания растений позволяет увеличить количество подвижных форм азота, фосфора и калия в дерново-подзолистой почве по сравнению с контролем во все периоды определений (в среднем на 7,5 – 28,5%). Содержание подвижных форм элементов питания при использовании комплексоната бора (В-ЭДДЯК) на минеральном фоне незначительно уступало значениям других вариантов (в среднем на 2,5 – 4,2%), но позволило получить больший урожай корнеплодов моркови.

По отношению к контролю опрыскивание растений раствором боросодержащего хелата на неудобренном фоне позволяет увеличивать урожайность моркови на 16,3%, а совместное применение минеральных удобрений и раствора В-ЭДДЯК – на 46,5%. Кроме того, под действием минеральных удобрений и боросодержащих растворов изменились значения показателей, характеризующих качественный состав корнеплодов моркови (в частности, количество витамина С и каротина). Наибольшим содержанием аскорбиновой кислоты (24,5 мг/100 г) отличался вариант с обработкой борной кислотой на удобренном фоне. Однако при большем выходе корнеплодов на варианте с В-ЭДДЯК на минеральном фоне, общий выход витамина С превысил значения остальных вариантов. Наибольшее количество каротина (10,8 мг/100 г) среди удобренных вариантов выявлено в корнеплодах с обработкой растений боратным комплексом. Применение боросодержащих растворов на неудобренном фоне не привела к заметному увеличению каротина в корнеплодах (в среднем на 0,3 – 0,4 мг/100 г больше по сравнению со значением контрольного варианта).

УДК: 544.43

Долгов Георгий Дмитриевич

## **DFT-МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА S-ТИОЛИРОВАНИЯ L-ЦИСТЕИНА В ПРИСУТСТВИИ СЕРОСОДЕРЖАЩИХ ИОНОВ**

Руководитель: Т.В. Берестова

Башкирский государственный университет, г. Уфа  
Кафедра физической химии и химической экологии

Биологическая активность белков, пептидных гормонов и других производных веществ в первую очередь определяется пространственной организацией третичной структуры. Один из важнейших факторов, способствующих её образованию, — S-тиолирование цистеина, входящего в полипептидную цепь. Кроме того, антиоксидантная способность тиолов задаёт направление исследований не только в области синтеза противоопухолевых препаратов, но и в пищевой промышленности.

Окисление тиолсодержащих соединений играет ключевую роль в биохимии и выполняет очень широкий спектр функций, включая передачу сигнала, регулирование активности ферментов, белковых каналов, а также антиоксидантных реакций.

Первоначально к L-цистеину присоединяется  $S_2O_3^{2-}$  с образованием L-CysSO<sub>3</sub>H и выделением H<sub>2</sub>S. По-видимому, данная стадия является лимитирующей ввиду стерически затрудненного иона. L-CysSO<sub>3</sub>H может переходить в L-CySOH с выделением SO<sub>2</sub>, а также вступать в реакцию с исходным L-цистеином. Подобное взаимодействие, по-видимому, приводит к образованию основного продукта реакции — L-цистина [1]. Кроме того, мы полагаем, что CysSO<sub>3</sub>H взаимодействует с ранее образовавшимся L-CySOH, образуя L-цистин.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Khavani M., Izadyar M., Reza Housaindokht M. Quantum chemistry study on the mechanism of oxidation of cysteine to cystine using hydrogen peroxide // Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements. 2015. Vol. 190, № 10. P. 1680–1691.

УДК: 615.322

Дорошенко Иван Дмитриевич

## **СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА С ПОМОЩЬЮ ЭКСТРАКТОВ МАТЬ-И-МАЧЕХИ**

Руководитель: С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

В настоящее время разработка новых методов получения наночастиц металлов с целью их дальнейшего применения в различных областях нанотехнологии и медицины вызывает большой интерес. Например, внимание исследователей привлекает возможность «зеленого» синтеза наночастиц серебра (НЧС) с применением экстрактов растений как альтернативы химических методов получения наночастиц. Метод «зеленого» синтеза экологически безопаснее, так как в нем не используются токсические соединения, и более экономичен.

Цель данной работы – синтез наночастиц серебра (НЧС) с помощью образцов лекарственного растения мать-и-мачехи, собранных в местах с различной антропогенной нагрузкой. Анализ содержания биоактивных веществ в исследуемых образцах и их способность восстанавливать ионы серебра с образованием НЧС были проведены методом УФ спектроскопии. Сбор растений был произведен 15 июня 2020 г. в пяти различных районах города Твери (СНТ «Светлый»; Парк Победы; Площадь Гагарина; ЖК Volga Life; мкрн. Мигалово; СНТ «Рябинки» - «фонозная зона»).

Для проведения спектрального анализа листья растений были высушены, измельчены, приготовлены водные экстракты. Спектры регистрировали на спектрометре «Evolution Array» фирмы «Thermo Scientific» в кварцевой кювете с толщиной слоя 5 мм. Для синтеза наночастиц серебра (НЧС) в водные экстракты добавляли нитрат серебра и фиксировали поглощение в области 350–550 нм через различные промежутки времени: 5 мин, 3 ч, 1, 2 дня.

В ходе эксперимента было установлено, что с течением времени в водных экстрактах мать-и-мачехи под влиянием биоактивных веществ, содержащихся в образцах, происходит восстановление ионов серебра. Однако процесс образования НЧС в экстрактах протекает с различной скоростью, что свидетельствует о разном количестве биоактивных веществ в образцах, собранных в различных районах. Анализируя полученные данные, можно обнаружить корреляцию между антропогенной нагрузкой и способностью исследуемых образцов восстанавливать ионы серебра.

*Данная работа выполнена на оборудовании ЦКП ТвГУ.*

УДК: 538.9

Дунаева Галина Григорьевна

## ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ НА ПОВЕРХНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛА $\text{SmCo}_5$

Руководитель: А.Ю. Карпенков

Тверской государственный университет  
Кафедра физики конденсированного состояния

Анализ трансформации магнитной доменной структуры позволяет оценить поле насыщения исследуемого образца. Целью данной работы являлось исследование трансформации доменной структуры (ДС) соединения  $\text{SmCo}_5$  на краю и в центре поверхности шлифа.

В качестве объекта исследования было выбрано данное соединение, т.к. оно характеризуется магнитокристаллической анизотропией типа «лёгкая ось» при комнатной температуре и является высокоанизотропным (поле анизотропии  $H_A \approx 400$  кЭ, намагниченность насыщения  $4\pi I_s \approx 10$  кГс).

Эксперимент проводился с помощью установки на базе металлографического микроскопа Neophot-30, позволяющей в автоматическом режиме управлять магнитным полем и регистрировать изображения ДС. На рисунке 1 отображены микрофотографии ДС на краю и в центре исследуемых локальных участков поверхности.

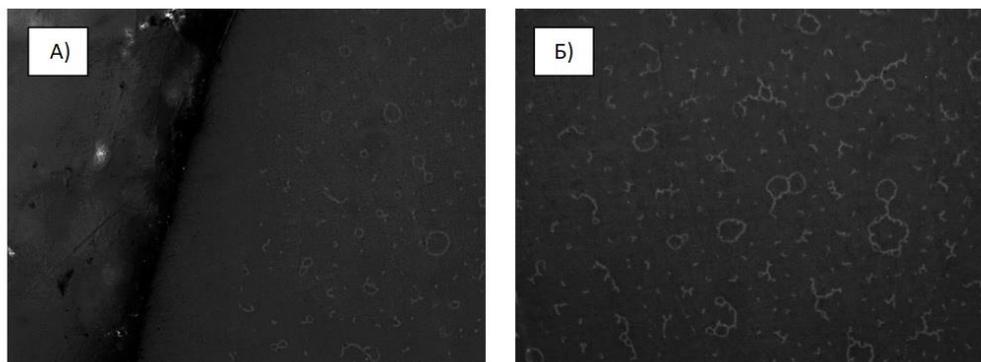


Рис.1 Микрофотографии конфигурации ДС соединения  $\text{SmCo}_5$  при напряженности магнитного поля  $H = 8,6$ кЭ: А) на краю, Б) в центре исследуемой базисной поверхности

В ходе исследования было обнаружено различие в магнитном поведении: краевая доменная структура не наблюдается в полях, меньших значения поля насыщения всего образца. Моделирование распределения размагничивающего поля показывает, что его значение на краях исследуемого образца меньше, чем в центре, следовательно, необходимо приложить меньшее внешнее магнитное поле для насыщения локальных прикраевых участков поверхности образца.

УДК: 678.746.222+542.913

Еремченкова Наталья Эдуардовна

## ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА СШИТЫХ ПОЛИМЕРОВ

Руководители: Л.Ж. Никошвили, А.В. Быков

Тверской государственной технической университет, г. Тверь  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Получение и интенсивное исследование новых типов сшитых полимеров приводит к расширению области их практического использования, в частности для сорбции и разделения газов, в качестве катализаторов, в хроматографии, в различных промышленных сорбционных технологиях (очистка воды, селективная сорбция биологически-активных веществ и других органических соединений в фармацевтической промышленности).

Под действием небольших количеств специальных химических реагентов – сшивателей – в полимерах протекают межмолекулярные химические реакции сшивания, которые в дальнейшем приводят к образованию пространственной трехмерной сетки. Сшитый полимер приобретает новые уникальные физические свойства: повышенная стойкость к агрессивным средам, термостабильность, развитая нанопористая структура, большая удельная площадь поверхности, способность в несколько раз увеличивать свой объём при поглощении различных органических жидкостей.

Как правило, синтез пористых ароматических соединений проводится с помощью соответствующих реакций полимеризации. Свойства конечного материала при этом определяются структурой и размером выбранных мономеров, а также используемым методом синтеза. В данной работе сшивку ароматических фрагментов молекул-мономеров осуществляли с помощью реакции Фриделя-Крафтса. В качестве катализатора использовали безводный  $FeCl_3$ , органической фазы – дихлорэтан, ароматическими мономерами послужили бензол, нафталин, анилин. Роль сшивающего агента выполнял метилаль. Полученный продукт экстрагировали метанолом в аппарате Сокслета с последующей сушкой под вакуумом.

Таким образом, в ходе работы был получен сшитый полимер в виде темно-коричневого порошка. Площадь его поверхности составила  $705 \text{ м}^2/\text{г}$ . В дальнейшем рассматривается возможность применения полимерной матрицы сшитого полимера в качестве носителя для синтеза катализаторов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда  
(проект №20-19-00386).*

УДК: 004.052.4

Жигунов Дмитрий Владиславович

## РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА ПО КОНТРОЛЮ ЦЕЛОСТНОСТИ ДАНЫХ И ИСПРАВЛЕНИЮ ОШИБОК НА ПЛИС

Руководитель: А.А. Репин

Тверской государственной университет, г. Тверь  
Кафедра общей физики

В процессе передачи сигнала на линию связи воздействуют шумы, которые могут исказить содержание первоначального сообщения. Избавиться от этих помех довольно сложно, а иногда практически невозможно, поэтому в подобных системах принято использовать контроль ошибок. В основе данного подхода лежат алгоритмы восстановления данных, описанные в теории помехоустойчивого кодирования [1].

Для создания помехоустойчивой системы выбран код Рида-Соломона [1], поскольку он позволяет исправить сразу несколько возникших ошибок [2]. В программе Xilinx ISE DesignSuite 14.7 на языке VHDL мной реализован корректор ошибок, состоящий из кодера и декодера. Кодер выполняет добавление к исходному массиву данных контрольных битов четности. Декодер состоит из подмодулей обнаружения и коррекции ошибок. Первый позволяет обнаружить любое несовпадение между исходными и полученными данными, а второй исправить от 1 до 2 ошибочных 4-битовых элементов в сообщении из 48 бит. Если ошибок не обнаружено, то контрольные биты отбрасываются и искомые данные передаются дальше без изменений.

Оба модуля имеют возможность быстрого масштабирования под определенную длину кодового слова за счет вынесения повторяющихся констант и функций в отдельную библиотеку. Максимальная рабочая частота устройства составляет 241 МГц.



Рисунок – Функциональная схема работы помехоустойчивой системы

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Блейхут Р. Теория и практика кодов, контролирующих ошибки // Пер. с англ. – М.: Мир. – 1986. – 576 с.
2. Ахметов Н. Р. Алгоритмы помехоустойчивого кодирования и их аппаратная реализация на основе ПЛИС / Н.Р. Ахметов, А.А. Макаров // Казань: «Молодой ученый». – 2015. – №13 (93). – С. 92-96.

УДК: 678.6

Жохов Илья Сергеевич

## ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ АЦИЛИРУЕМЫХ МОНОМЕРОВ В ПРОЦЕССЕ СИНТЕЗА ПОЛИАМИДОВ ПТ И 6ПТ

Руководитель: Е.И. Лагусева

Тверской государственной технической университет, г. Тверь  
Кафедра химии и технологии полимеров

Концентрационная зависимость выхода, молекулярной массы и других показателей синтезируемых полимеров в непрерывном пенном режиме экспериментально изучена в двухступенчатом конфузоре-диффузоре реакторе-фибридаторе [1].

Таблица

Влияние концентрации пиперазина и гексаметилендиамина на синтез гомо- и сополиамидов ПТ и 6ПТ ( $T_{г.ф.}=200-210\text{ }^{\circ}\text{C}$ ;  $T_{ж.ф.}=98-100\text{ }^{\circ}\text{C}$ )

Номер опыта	Полиамид	Состав жидкой фазы, кмоль/м <sup>3</sup>		$C_{ХА}^{г.ф.}$ , моль/м <sup>3</sup>	пДА/пХА, моль/моль		$W_{г.}$ , м/с	$P_{изб.}$ , МПа	$\eta_{прив.} \cdot 10^2$ , м <sup>3</sup> /кг	Выход, %
		ГМДА	Пиперазин		Г ст	П ст				
1	ПТ	-	0,01	0,10	1:1	-	17	0,02	7,8	37,4
2	ПТ	-	0,01	0,10	1,5:1	-	17	0,02	9,2	17,0
3	ПТ	-	0,1	0,65	1,38:1	2,05:1	34	0,02	8,6	45,7
4	ПТ	-	0,1	0,88	1:1	1,5:1	34	0,05	6,2	63,8
5	ПТ	-	0,1	1,00	1:1	1,5:1	34	0,05	6,4	64,6
6	6ПТ-30	0,03	0,07	1,00	1:1	1,5:1	32	0,05	9,4	72,5
7	6ПТ-40	0,04	0,06	1,00	1:1	1,5:1	32	0,05	10,0	74,3
8	6ПТ-50	0,05	0,05	1,00	1:1	1,5:1	32	0,05	9,2	76,7
9	6ПТ-60	0,06	0,04	1,00	1:1	1,5:1	32	0,05	9,0	91,7
10	6ПТ-70	0,07	0,03	1,00	1:1	1,5:1	32	0,05	8,8	91,9

Примечание:  $T_{г.ф.}$  – температура газовой фазы;  $T_{ж.ф.}$  – температура жидкой фазы; ГМДА – гексаметилендиамин;  $C_{ХА}^{г.ф.}$  – концентрация терефталойлхлорида в газовой фазе, пДА/пХА – мольное соотношение мономеров жидкой и газовой фаз;  $W_{г.}$  – линейная скорость газовой фазы,  $P_{изб.}$  – давление в реакторе;  $\eta_{прив.}$  – приведённая вязкость.

Молекулярная масса, морфология и физико-механические показатели синтезируемых сополиамидов-6ПТ удовлетворительны, выход полиамида-ПТ невысок из-за пониженной реакционной способности пиперазина и его более низкой в сравнении с гексаметилендиамином и другими высшими алифатическими диаминами поверхностной активностью [2].

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Концентрации мономеров в контактирующих фазах в процессе газожидкостной поликонденсации / В.А. Никифоров и др. // Физикохимия полимеров: сборник научных трудов, 2005, вып.11. С. 213-218.
2. Газожидкостная поликонденсация: монография / В.А. Никифоров и др., 2004. 268 с.

УДК: 544.169

Завилейская Виктория Алексеевна  
**СРАВНЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ  
D- И L- КОНФОРМЕРОВ ЦИСТЕИНА**

Руководители: Н.П. Русакова, В.В. Туровцев

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра физической химии

Строение конформеров *L*- (с водородными взаимодействиями N<sup>⋯</sup>H и O<sup>⋯</sup>H молекула I, без - II) и *D*-цистеина (с N<sup>⋯</sup>H - III, без - IV) оптимизировано методом ВЗЛУР. Заряд, объем и электронная энергия групп ( $q(R)$ ,  $V(R)$ ,  $E(R)$ ) получены в рамках «квантовой теории атомов в молекулах». Полные энергии групп пересчитаны в относительные  $\Delta E(R)$ .

Связевые пути в энантиомерах I и III, отвечающие внутримолекулярным слабым взаимодействиям (ВМСВ) N<sup>⋯</sup>H, формируются атомом водорода фрагмента COOH и азотом NH<sub>2</sub>. ВМСВ O<sup>⋯</sup>H образовано атомом H тио- и O карбоксильной групп. Наличие ВМСВ определяется сигнатурой КТ (3; -1) на связевых путях O<sup>⋯</sup>H и N<sup>⋯</sup>H.

Заряды групп COOH и SH молекул *D* формы меньше, чем в *L*-АМК (Таблица). Наличие N<sup>⋯</sup>H в I и III приводит к снижению  $q(\text{NH}_2)$  за счет оттока доли электронной плотности ( $\rho(r)$ ) водорода COOH в атомный бассейн NH<sub>2</sub>, по сравнению с молекулами, где ВМСВ отсутствует. Наличие N<sup>⋯</sup>H стабилизирует группу NH<sub>2</sub> (её энергия понижается) с одновременным уменьшением  $V(\text{NH}_2)$ . Присутствие O<sup>⋯</sup>H в I приводит к оттоку  $\rho(r)$  от SH в бассейн более электроотрицательной COOH, и  $q(\text{SH})$  повышается, а её объем становится меньше, чем  $V(\text{SH})$  изомеров II, III, IV.

Таблица

Заряд  $q(R)$ , энергия  $E(R)$  и объем  $V(R)$  групп конформеров *L*- и *D*-цистеина

$q(R)$ , а.е.					
молекула	NH <sub>2</sub>	CH	COOH	CH <sub>2</sub>	SH
I	-0,316	0,398	-0,107	0,011	0,014
II	-0,294	0,409	-0,136	0,046	-0,025
III	-0,350	0,446	-0,144	0,074	-0,026
IV	-0,303	0,441	-0,141	0,032	-0,029
$\Delta E(R)$ , кДж/моль					
I	40	0	60	0	30
II	80	30	0	20	10
III	0	80	20	50	0
IV	50	60	20	0	10
$V(R)$ , Å <sup>3</sup>					
I	25,74	13,62	45,24	23,02	38,04
II	26,52	13,82	45,80	22,61	38,70
III	26,02	13,44	46,33	22,41	38,30
IV	26,40	13,44	46,26	22,69	38,58

УДК: 595.78: 54.05

Зайцева Любовь Анатольевна

## ПОЛУЧЕНИЕ МЕЛАНИНА ИЗ ПРОДУКТОВ ЖИЗНЕДЕЯТЕЛЬНОСТИ НАСЕКОМЫХ

Руководитель: Е.А. Прутенская, к.б.н., доцент

Тверской государственный технический университет  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Меланины – высокомолекулярные пигменты сетчатой нерегулярной структуры, отличаются большим разнообразием строения и физиологических функций. Меланины имеют высокую физиологическую активность, которая проявляется в противовоспалительных, антитоксичных, антиопухолевых и других свойствах, чем обусловлено их применение в медицине, фармацевтике, косметологии и других областях.

Продуцентами меланиновых веществ являются практически все эукариотические организмы. Большой интерес представляют насекомые, способные к разведению в искусственных контролируемых условиях. Полученная биомасса таких насекомых может использоваться для выделения биологически активных веществ, перспективных для практического использования [1]. Например, разработана технология получения хитозан–меланинового комплекса (ХМК) и меланина из подмора пчел. В Уфимском научном центре был разработан способ получения меланина из мухи черная львинка *Hermetia illucens* [2]. Меланин выделяют из личинок, не прибегая к агрессивным воздействиям химических реагентов.

На кафедре БХиС ТвГТУ совместно с ООО «Жива» был разработан способ получения меланина из продуктов жизнедеятельности большой пчелиной моли (*Galleria mellonella*) [3].

Предварительное извлечение воска из продукта жизнедеятельности моли позволяет увеличить выход меланина с 6% до 11% и повысить чистоту конечного продукта.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Получение и характеристика меланина *Alphitobius diaperinus* / Н.А. Ушакова [и др.] // Прикладная биохимия и микробиология. 2018. –N 4. –С.408–415. Библ. 13 назв.
2. Пат. 2 708232 Российская Федерация, МПК А61К 35/64. Способ комплексной переработки продуктов жизнедеятельности *Galleria mellonella*. - № 2019108130, заявл. 21.03.2019, опубл. 05.12.2019, Бюл. № 34. – 7 с.

УДК: 663.93

Закотяжкин Никита Александрович

## ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОФЕ

Руководители: Л.В. Михеева, Н.В. Дубинина

Муниципальное бюджетное общеобразовательное учреждение  
«Средняя школа № 19», Тверь

Кофе - один из самых популярных и наиболее значимых в повседневной жизни человека напитков. В кофе содержится набор веществ, которые воздействуют на вкус, аромат и полезность кофейного напитка для человеческого организма. В связи с большим разнообразием видов кофе необходимо получать достоверную информацию об их физико-химических свойствах, поэтому изучение свойств кофейного напитка всегда актуально. Таким образом, цель моей работы – лабораторное исследование физико-химических свойств разных видов кофе. Для проведения исследований мною были использованы методы диффузионного отражения, спектрофотометрии, фотометрического определения массовой доли кофеина в растворе и рефрактометрическим методом. Оптические исследования проводились соответственно в ультрафиолетовой и инфракрасной областях. В целом спектры разных видов кофе достаточно похожи и различаются только интенсивностью, что позволяет судить о схожести состава образцов и различиях в концентрации извлеченных компонентов. Было выяснено, что растворимый кофе содержит наибольшее количество экстрактивных веществ, что проявляется в его спектре, при этом насыщенность этого напитка гораздо меньше, чем молотого в растворимом. Таким образом, понятно, что из молотого кофе, изначально содержащего в порошке меньше экстрактивных веществ (34,3), в напиток их переходит, наоборот, гораздо больше. Также можно наблюдать присутствие в образцах типичных для кофе веществ: кофеина, теофиллина, теобромина, хлорогеновых кислот и их производных, - показатели которых находятся в пределах нормы. По итогам исследований выяснено, что физико-химический состав различных видов кофе различается и при выборе одного из них следует подробнее ознакомиться с его свойствами. Например:

- наибольшее рН напитка (5,68) и содержание золы (0,15) у молотого кофе, а наименьшее у молотого в растворимом (5,13) (0,13);
- наибольшая массовая доля кофеина в растворимом (2,95%), а наименьшая в молотом кофе (1,13%).

(данные показатели наиболее актуальны для потребителей кофейного напитка).

УДК: 541.49; 615.33

Зеников Герман Романович

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ГИДРОГЕЛИ  
НА ОСНОВЕ АМИНОКИСЛОТЫ L-ЦИСТЕИН,  
НИТРАТА СЕРЕБРА И ХИТОЗАНА**

Руководитель: С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Изучение процессов гелеобразования в супрамолекулярных системах на основе низкомолекулярных соединений (аминокислот, пептидов и т.д.) представляет огромный интерес в связи с возможностью применения в различных областях – медицине, фармакологии, косметологии и т.д. В данной работе изучается гелеобразование в водных растворах серосодержащей аминокислоты *L*-цистеин (*L*-cys), нитрата серебра и аминополисахарида хитозана. Биополимер хитозан обладает рядом уникальных свойств, таких как биосовместимость, способность к биодеградации, нетоксичность, антимикробная активность, что расширяет спектр потенциального применения материалов на основе *L*-Cys-AgNO<sub>3</sub> гидрогелей.

Исследуемые образцы были получены двухстадийным методом: 1 стадия – получение цистеин-серебряного раствора (ЦСР), 2 стадия – введение в раствор инициатора гелеобразования. Были синтезированы серии образцов с различной концентрацией хитозана, который, как было установлено в ходе эксперимента, способствует формированию гелевой структуры. Кроме того, получены гидрогели, содержащие в качестве инициатора гелеобразования хитозан и сульфат натрия. Для сравнения в экспериментах использовали ЦСР и гели с сульфатом натрия. При этом концентрация *L*-cys в разных образцах варьировалась от 2,83 до 2,94 мМ, нитрата серебра – от 3,52 до 3,68 мМ, сульфата натрия – от 0,2 до 0,6 мМ, хитозана – от 0,01 до 0,05 об.%. Низкое содержание исходных компонентов в гидрогелях (*L*-cys и AgNO<sub>3</sub>), позволяет назвать их низкоконцентрированными. Процессы структурирования в гелеобразцах изучали с помощью методов УФ спектроскопии и вискозиметрии. Было установлено, что прочностные свойства гелей зависят от концентрации инициаторов гелеобразования и проходят через максимум при определенном значении.

*Данная работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии центра коллективного пользования ТвГУ*

УДК: 544.169; 544.135

Зиганшин Александр Витальевич

## QTAИМ АНАЛИЗ 15-КРАУН-5 И 1,4,7,10,13-ПЕНТАТИО-15-КРАУН-5

Руководители: Н.П. Русакова, В.В. Туровцев

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Структурные формулы краун-эфиров: 15-краун-5 (I) и 1,4,7,10,13-пента-тио-15-краун-5 (II) (Рис.) отличаются составом гетероатомов, в случае II – это атомы серы. Методика проведения квантовохимического исследования подробно разобрана в работах [1,2].

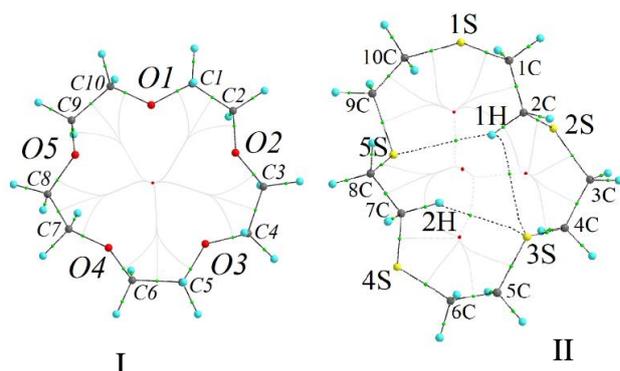


Рис. Оптимизированная геометрия 15-краун-5 (I) и 1,4,7,10,13-пента-тио-15-краун-5 (II). Изображены молекулярные графы и ВМСВ в II

Таблица 1

Внутримолекулярные слабые взаимодействия в молекуле II.

	Атомный состав цикла	ВМСВ, в составе цикла
II	-C3 - C4 - S3 ... H1 - C2 - S1-	S3 ... H1
	-C7 - H2 ... S3 ... H1 ... S5 - C8-	H2 ... S3, S3 ... H1, H1 ... S5
	-C2 - H1 ... S5 - C9 - C10 - S1 - C1-	H1 ... S5
	-C5 - C6 - S4 - C7 - H2 ... S3-	H2 ... S3

Таблица 2

Заряды групп\*  $q(R)$  в молекуле I и II.

	1R	1CH <sub>2</sub>	2CH <sub>2</sub>	2R	3CH <sub>2</sub>	4CH <sub>2</sub>	3R	5CH <sub>2</sub>	6CH <sub>2</sub>
I	-1,087	0,539	0,549	-1,094	0,546	0,549	-1,095	0,548	0,547
II	-0,018	0,017	0,009	-0,012	0,012	0,005	-0,036	0,004	0,017
	4R	7CH <sub>2</sub>	8CH <sub>2</sub>	5R	9CH <sub>2</sub>	10CH <sub>2</sub>			
I	-1,097	0,548	0,545	-1,093	0,523	0,570			
II	-0,018	0,015	-0,01	0,014	0,007	-0,006			

\*  $R = S, O$  и  $CH_2$ ; в затемненных ячейках показаны заряды серы

Молекула I не обладает элементами симметрии и в ее структуре отсутствуют внутримолекулярные слабые взаимодействия (ВМСВ). Соединение II также не симметрично, но в ее составе найдено три ВМСВ (S...H) (Рис., Таблица 1). Наличие ВМСВ в II показывает перераспределение электронной плотности в атомных бассейнах S и их донорные свойства, что отражается в величинах зарядов ( $q(S)$ ) (Таблица 2). Самое низкое значение  $q(S)$  приходится на атом, участвующий сразу в двух ВМСВ (Рис., Таблица 1), где  $q(3S) = -0,036$  а.е. Все заряды кислорода в I, за исключением 1O, близки по значению друг другу.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Н.П. Русакова, Г.А. Курочкин, Ю.И. Сафронова, В.В. Туровцев // Вестник ТвГУ. Серия: Химия 2020. Т. 40. №2. С. 53-61.
- Н.П. Русакова, Ю.Д. Орлов, В.В. Туровцев // Журнал структурной химии 2020. Т. 61. №12. С. 1951-1957.

УДК: 543.611

Зуева Алёна Сергеевна

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ АСПИРИНА  
РАЗНЫХ ПРОИЗВОДИТЕЛЕЙ**

Руководитель: Н.В. Баранова

Тверской государственной университет, г. Тверь  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Одной из важнейших проблем российского здравоохранения в настоящее время является контроль качества лекарственных препаратов. Несоответствие заявленной и фактической дозировки активного вещества в выпускаемых формах, а также фальсифицированные препараты могут повлечь за собой серьёзные последствия при лечении пациентов.

В качестве объекта исследования был выбран аспирин четырёх различных производителей (АО «ФП «Оболенское», ЗАО «ПФК Обновление», ОАО «Фармстандарт-Лексредства», «Байер Биттерфельд ГмбХ»). Все препараты содержат ацетилсалициловую кислоту в качестве активного вещества.

Количественное определение ацетилсалициловой кислоты проводили методом алкалиметрического титрования [1]. Результаты исследования приведены в таблице 1.

Таблица 1

Результаты количественного определения ацетилсалициловой кислоты

Алкалиметрический анализ	Масса ацетилсалициловой кислоты, мг	
	Теоретическая масса	Практическая масса
АО «ПФК Обновление», Россия	500,00	495,73
ОАО «Фармстандарт-Лексредства», Россия	500,00	499,04
«Байер Биттерфельд ГмбХ», Германия	300,00	295,05
«ФП Оболенское», Россия	50,00	46,85

В результате проведенного анализа разных лекарственных препаратов, содержащих ацетилсалициловую кислоту, можно сделать вывод о соответствии заявленного и фактического количества активного вещества в одной таблетке от разных производителей, что подтверждает подлинность данных препаратов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Государственная фармакопея XIV. Ацетилсалициловая кислота. – М: МЗ РФ, 2018. – С.3413.

УДК: 537.226.4

Иванов Владислав Владимирович

## ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПЛЕНОК $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$

Руководитель: И.Л. Кислова

Тверской государственной университет, г. Тверь  
Кафедра физики конденсированного состояния

В работе исследовались температурные зависимости электрической емкости и тангенса угла диэлектрических потерь в тонких пленках сегнетоэлектрика-полупроводника  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ . Диэлектрические свойства исследовались с помощью измерителя иммитанса E7-20 в диапазоне частот от 25 Гц до 1 МГц.

На рис. 1 представлены температурные зависимости емкости образца при его нагреве до  $120^\circ\text{C}$  (а) и охлаждении (б).

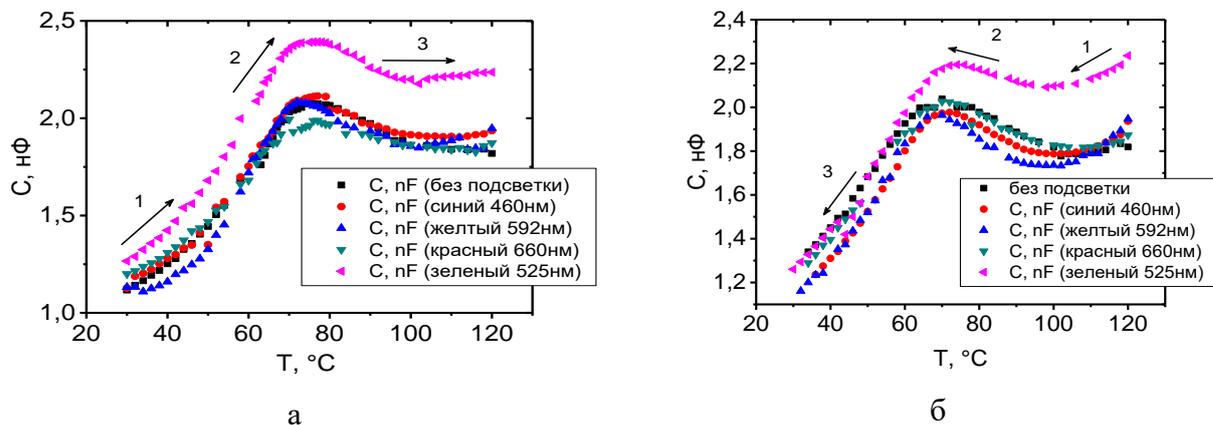


Рис. 1 Зависимость емкости пленки  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$  от температуры при нагреве (а) и охлаждении (б) с подсветкой различных длин волн

С увеличением температуры наблюдается рост диэлектрической проницаемости исследуемых пленок до температуры  $T_{\max \varepsilon} \approx 74^\circ\text{C}$ . При подсветке постоянным излучением видимого диапазона емкость заметно возрастает только для света с длиной волны 525 нм. Это значение соответствует краю собственного поглощения материала  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ . Также наблюдается незначительное смещение положения максимума в область более высоких температур (примерно на  $2^\circ\text{C}$ ). При охлаждении пленок максимум емкости, имеет более ярко выраженный характер, чем при нагреве. Данный температурный гистерезис объяснялся в рамках модели внутренних полей, направленных в сторону, противоположную естественной униполярности, и формирующихся в процессе старения пленок  $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$ .



УДК: 541.6

Калюжная Лиана Арслановна

## КОРРЕЛЯЦИИ «СТРУКТУРА – ЭНЕРГИЯ ГИББСА» ТИОСПИРТОВ. ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Руководитель: М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра физической химии

Целью настоящей работы является теоретико-графовое изучение корреляций “структура – энергия Гиббса” тиоспиртов.

В работе использовались методы теории графов и линейной алгебры, метод наименьших квадратов и т.д. [1-3].

В работе был проведен отбор топологических индексов (ТИ) с учётом их дискриминирующей способности, построены графические зависимости вида  $\Delta G^0_{298(r)} - \text{ТИ}$ , “ $\Delta G^0_{298(r)} - \text{номер изомера}$ ” и “ТИ – номер изомера”. Найдено, что величины  $\Delta G^0_{298(r)}$  хорошо коррелируют с индексами  $W$  и  $W'$ . С увеличением числа изомеров корреляции усложняются. Данный графический метод позволяет просто и наглядно оценить корреляционную способность ТИ со свойствами.

В работе обсуждены возможности теоретико-графового подхода в построении аддитивных схем расчёта и прогнозирования тиоспиртов (отмечено, что многие известные ТИ участвуют как числа параметров в конструировании таких схем). Например, в третьем приближении, учитывая взаимное влияние атомов, удалённых не далее, чем через три скелетных атома по цепи молекулы получаем:

$$P_{C_nH_{2n+1}SH} = p_1b + p'_1b' + p''_1b'' + p^*_1b^* + p_2\Gamma_{cc} + p'_2\Gamma_{cs} + R\Delta_{ccc} + R'\Delta_{ccs} + \\ + p_3\tau_{cc} + p'_3\tau_{cs} + p_4\omega_{cc} + p'_4\omega_{cs}$$

По данной схеме проведены численные расчеты энергии Гиббса тиоспиртов, согласующиеся с экспериментом. Получены новые ранее, неизвестные значения.

Также были исследованы зависимости вида  $P=f(\text{ТИ})$ . Выявлены уравнения, отвечающие наиболее тесной корреляционной связи между энергией Гиббса тиоспиртов и топологическими индексами.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Виноградова М.Г. // Вестник Тверского государственного университета. Серия «Химия»- 2017. - № 4. -С.73-78.
2. Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г. Теоретико-графовые методы в химии. Учебное пособие. -Тверь: ТвГУ. - 2013. - 88 с.
3. Виноградова М.Г. Расчётные методы исследования взаимосвязи “структура-свойство” в атом-атомном представлении. Дис. докт. хим. наук.–Тверь: ТвГУ.–2004. –440 с.

УДК: 543.087.9

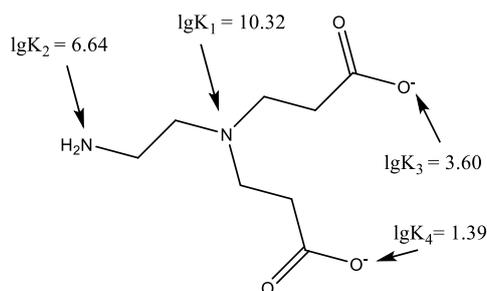
Караулова Дарья Александровна

## ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ЭТИЛЕНДИАМИН-N,N-ДИПРОПИОНОВОЙ КИСЛОТЫ С ДВУХВАЛЕНТНЫМИ КАТИОНАМИ D-ЭЛЕМЕНТОВ

Руководитель: В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Методом рН-метрического титрования при 25 °С на фоне 0.1 М KNO<sub>3</sub> определены константы протонирования нового комплексона асимметричного строения – этилендиамин-N,N-дипропионовой кислоты (as-eddp) и константы образования его комплексов с катионами Co<sup>2+</sup>, Ni<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup>, Cd<sup>2+</sup>. Математическая обработка усреднённых рН-метрических кривых проведена с использованием программы New DALSFEK (КСМ Soft). Схема протонирования аниона as-eddp<sup>2-</sup> представлена на рисунке:

Рис. 1. Схема протонирования as-eddp<sup>2-</sup>Таблица 1. Константы протонирования as-eddp<sup>2-</sup> и константы образования комплексов

Равновесие	lgβ
$H^+ + eddp^{2-} \rightleftharpoons Heddp^-$	10.32 ± 0.02
$2H^+ + eddp^{2-} \rightleftharpoons H_2eddp$	16.96 ± 0.02
$3H^+ + eddp^{2-} \rightleftharpoons H_3eddp^+$	20.56 ± 0.02
$4H^+ + eddp^{2-} \rightleftharpoons H_4eddp^{2+}$	21.95 ± 0.07
$Co^{2+} + eddp^{2-} \rightleftharpoons [Coeddp]$	7.64 ± 0.06
$Co^{2+} + H^+ + eddp^{2-} \rightleftharpoons [CoHeddp]^+$	13.54 ± 0.08
$Co^{2+} + 2 eddp^{2-} \rightleftharpoons [Co(eddp)_2]^{2-}$	10.97 ± 0.09
$Ni^{2+} + eddp^{2-} \rightleftharpoons [Nieddp]$	9.45 ± 0.07
$Ni^{2+} + H^+ + eddp^{2-} \rightleftharpoons [NiHeddp]^+$	14.46 ± 0.09
$Ni^{2+} + 2 eddp^{2-} \rightleftharpoons [Ni(eddp)_2]^{2-}$	13.13 ± 0.09
$Cu^{2+} + eddp^{2-} \rightleftharpoons [Cueddp]$	13.46 ± 0.06
$Cu^{2+} + H^+ + eddp^{2-} \rightleftharpoons [CuHeddp]^+$	17.55 ± 0.08
$Cu^{2+} + 2 eddp^{2-} \rightleftharpoons [Cu(eddp)_2]^{2-}$	17.30 ± 0.08
$Zn^{2+} + eddp^{2-} \rightleftharpoons [Zneddp]$	8.16 ± 0.05
$Zn^{2+} + H^+ + eddp^{2-} \rightleftharpoons [ZnHeddp]^+$	13.85 ± 0.09
$Zn^{2+} + 2 eddp^{2-} \rightleftharpoons [Zn(eddp)_2]^{2-}$	10.74 ± 0.09
$Cd^{2+} + eddp^{2-} \rightleftharpoons [Cdeddp]$	5.78 ± 0.05

УДК: 547.556.9

Кафтанов Арсений Дмитриевич

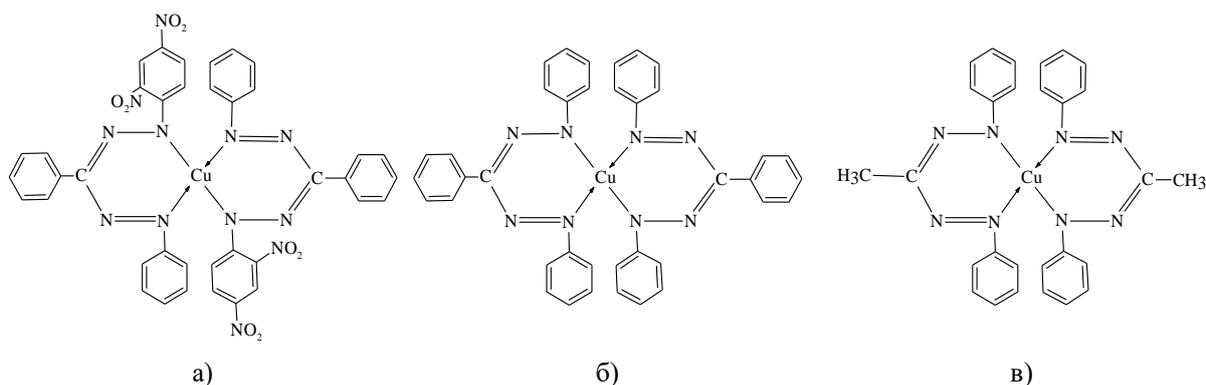
## МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСЫ МЕДИ С ПРОИЗВОДНЫМИ АЗОГИДРАЗОНОВ

Руководитель: И.Ю. Егорова

Тверской государственный университет  
Кафедра органической химии

Формазаны – это соединения, содержащие азогидразонную систему связей. Производные формазана широко применяются в аналитической химии как комплексообразователи, при определении таких металлов, как литий, таллий, галлий. В биохимии их используют при изучении ферментативных процессов в клетках. Также комплексы азогидразонов с металлами применяются как свето- и термостойкие красители для полиэфирных и полиамидных волокон, а также шерсти. С помощью различных ионов металлов и заместителей в формазане возможно получить цвета от желтого до темно-лилового. Данная работа посвящена получению комплексных соединений меди с производными азогидразонов.

Реакцией азосочетания солей диазония с 2,4-динитро- и фенилгидразонов бензальдегида и фенилгидразона оксопропановой кислоты получены три азогидразона, соответственно, 1,3-дифенил-5-(2,4-динитрофенил)-, 1,3,5-трифенил- и 1,5-дифенил-3-метилазогидразоны, на основе которых синтезированы их комплексные соединения с медью (II): а) бис[1,3-дифенил-5-(2,4-динитрофенил)-формазанат], б) бис[1,3,5-трифенилформазанат], в) бис[1,5-дифенил-3-метилформазанат].



Полученные соединения являются мелкокристаллическими веществами от темно-синего до фиолетового цвета. Физико-химические свойства и строение формазанатов меди (II) в данный момент изучаются.

УДК: 661.1

Ковальчук Ксения Михайловна

**ВЛИЯНИЕ НЕИОНОГЕННЫХ ПАВ НА СЕДИМЕНТАЦИОННУЮ УСТОЙЧИВОСТЬ СУСПЕНЗИИ МЕНТОЛА**

Руководитель: доцент, к.х.н. Веролайн Н. В.

Тверской государственный университет  
Кафедра органической и биоорганической химии

Для повышения седиментационной устойчивости суспензий необходимо максимально понизить склонность дисперсионной фазы к коагуляции. Для этой цели на практике широко используются неионогенные поверхностно-активные вещества (НПАВ), способные адсорбироваться на границе раздела твердая фаза – дисперсионная среда и стабилизировать суспензию [1].

В качестве модели для исследования в настоящей работе был выбран ментол, синтанол промышленного производства ДС-10, сорбитан SPAN-80, а также твин-80. Дисперсионным методом были приготовлены суспензии гидрофобного вещества с добавлением стабилизаторов различных концентраций и проведена дальнейшая оценка седиментационной устойчивости каждого раствора. Выяснено, что в суспензиях, стабилизированных твином-80, с увеличением концентрации раствора время оседания гидрофобных частиц уменьшается и в минимальной точке значение составляет 4 минуты, что на 40 секунд превышает минимальное значение синтанола ДС-10 и на 90 секунд значение сорбитана SPAN-80.

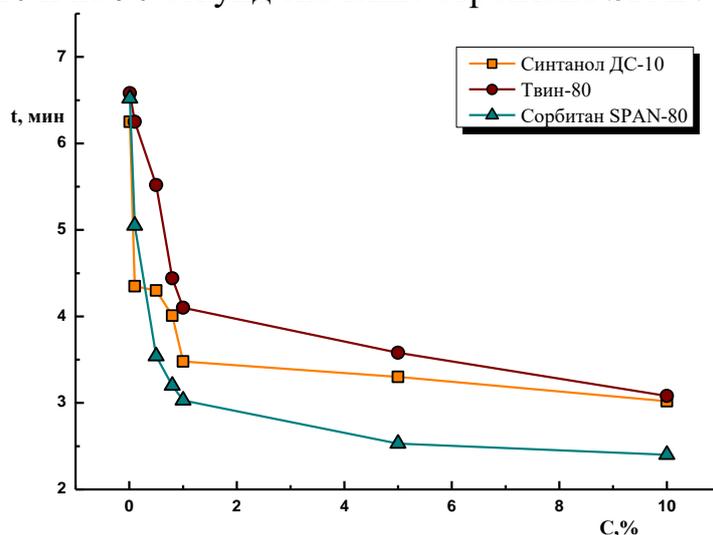


Рис. 1. Зависимость времени оседания частиц от концентрации суспензий с различными стабилизаторами.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Латенко Д.Г. и др. Анализ факторов, влияющих на седиментационную устойчивость суспензий на основе полимеров и металлических порошков // Вопросы материаловедения. 2009. №1. С.46-51.

УДК: 541.6

Козлова Рада Романовна

## ТЕОРИЯ ГРАФОВ В ИССЛЕДОВАНИИ КОРРЕЛЯЦИЙ «СТРУКТУРА – ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ» ГЛИКОЛЕЙ

Руководитель: М.Г. Виноградова

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра физической химии

Актуальной задачей современной химии является поиск закономерностей между свойствами молекул ( $P$ ) и их строением и решение этой задачи даже для одного класса соединений значительно расширяет возможности теоретической химии. Целью настоящей работы является – установление количественных корреляций «структура-энтальпия образования» в двухатомных спиртах.

В работе использовались методы теории графов, статистического анализа, линейной алгебры, метод наименьших квадратов и т.д. Для достижения поставленной цели были исследованы зависимости вида  $P=f(\text{ТИ})$ . Выявлены уравнения, отвечающие наиболее тесной корреляционной связи между энтальпией образования ( $\Delta_f H^0_{298(\text{ж})}$ ) гликолей и топологическими индексами (ТИ) [1-3]. В работе построены расчетные схемы в разных приближениях. Так в третьем приближении для гликолей имеем:

$$P_{C_n H_{2n+2} O_2} = a + bn + p_2 \Gamma_{cc} + p'_2 \Gamma_{co} + p''_2 \Gamma_{oo} + R \Delta_{ccc} + \\ + R' \Delta_{cco} + R'' \Delta_{coo} + p_3 \tau_{cc} + p'_3 \tau_{co} + p''_3 \tau_{oo} + p_4 \omega_{cc} + p'_4 \omega_{co} + p''_4 \omega_{oo}$$

Здесь  $p_2, p_3, p_4, \dots$  – соответственно такие индексы как число путей длины два, три;  $R$  – число троек смежных ребер;  $n$  – число атомов углерода;  $b, \Gamma_{cc}, \dots$  - соответствующие параметры.

По данной схеме проведены численные расчёты  $\Delta_f H^0_{298(\text{ж})}$  гликолей, согласующиеся с экспериментом. Получены новые данные. Также были построены и проанализированы графические зависимости вида “Энтальпия образования – ТИ” и др. Найдено, что в одних случаях наблюдается симбатное изменение энтальпии образования и ТИ, например,  $\Delta_f H^0_{298(\text{ж})}$  и индексов Винера  $W$  и Балабана  $J$ , что свидетельствует о хорошей корреляции между  $\Delta_f H^0_{298(\text{г})}$  и ТИ.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г. Теоретико-графовые методы в химии. Учебное пособие. -Тверь: ТвГУ. - 2013. - 88 с.
2. M. G. Vinogradova, Yu. A. Fedina and Yu. G. Papulov. Graph Theory in Structure–Property Correlations// Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2016.-Vol. 90. - No. 2. - pp. 411–416.
3. Виноградова М.Г. Расчётные методы исследования взаимосвязи “структура-свойство” в атом-атомном представлении. Дис. докт. хим. наук .–Тверь: ТвГУ.–2004. –440 с.

УДК: 544.351

Кокорин Сергей Александрович

## КИНЕТИКА РАСТВОРЕНИЯ ЛАТУНИ В СЕРНОКИСЛОЙ СРЕДЕ

Руководитель: В.И. Луцик

Тверской государственный технический университет, г. Тверь

Кафедра химии и технологии полимеров

Изделия из латуни часто эксплуатируют в кислой среде. При этом важно знать детали химического поведения этого сплава. Имеющиеся в литературе сведения содержат в основном технологические оценки, важные для эксплуатации изделий в различных условиях. Нет описаний кинетики взаимодействия с растворами в виде многофакторных математических моделей, и анализа полученных зависимостей. В работе проведено изучение кинетики растворения медно-цинкового сплава в серной кислоте при насыщении раствора кислородом.

В качестве основного метода исследования выбран метод вращающегося диска. Изучены зависимости удельной скорости растворения латуни Л68 ( $W$ , моль/дм<sup>2</sup>с) от величин влияющих факторов ( $C_n$ , моль/дм<sup>3</sup>;  $T$ ,  $K$ ; частоты вращения диска  $\omega$ , с<sup>-1</sup>).

Для построения математической модели процесса применен метод факторного планирования эксперимента (план ПФЭ 2<sup>3</sup>). В качестве функции отклика принят  $\lg W$ , а влияющие факторы представлены в виде  $\lg C$ ,  $1/T$  и  $\lg \omega$ , что позволило упростить вид ожидаемой полиномиальной модели. Адекватную полиномиальную модель с целью ее физико-химической интерпретации [1] преобразовывали в уравнение вида

$$W = k \cdot C_n^m \cdot 10^{-E/RT} \cdot \omega^n.$$

В ходе эксперимента контролировали концентрацию в растворе цинка и меди. В условиях селективного перехода в раствор цинка, его определяли методом молекулярно-абсорбционной фотометрии по поглощению комплекса с ксиленоловым оранжевым. В присутствии окислителя имел место одновременный переход в раствор меди и цинка. Для определения концентрации этих металлов выбраны прямая потенциометрия с ионоселективным медным электродом (элит-227) и полярография переменного тока с использованием аммиачно-хлоридного полярографического фона.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Луцик В.И., Соболев А.Е. // Кинетика гидролитического и окислительного растворения сульфидов металлов. Тверь. 2009. 140 с.

УДК: 544.3

Коробов Михаил Александрович

## ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИКИ СУБЛИМАЦИИ DL-МЕТИОНИНА МЕТОДОМ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

Руководители: В.Б. Моталов, А.М. Дунаев

Ивановский государственный химико-технологический университет г. Иваново  
Кафедра физики

Эксперимент проводился на серийном магнитном масс-спектрометре МИ1201, переоборудованном для термодинамических исследований. Вещество загружалось в молибденовую ячейку Кнудсена с соотношением площади испарения к площади эффузионного отверстия  $\sim 400$ . Исследован высокочистый DL-метионин ( $>0,98$ ; Sigma-Aldrich). Термическая стабильность препарата контролировалась с помощью ИК-спектроскопии исходного соединения и остатка вещества в ячейке после эксперимента.

На рисунке 1 представлен масс-спектр исследуемого вещества при  $T = 431$  К и энергии ионизирующих электронов 40 эВ.

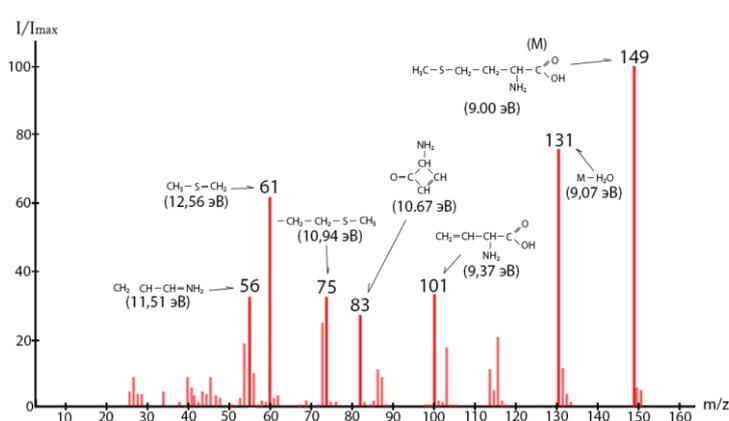


Рисунок 1 - Масс-спектр DL-метионина при  $T = 431$  К  
(в скобках даны энергии появления ионов,  $\pm 0,5$  эВ)

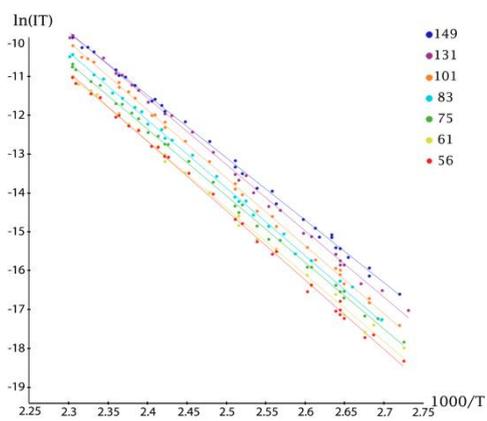


Рисунок 2 - Температурные зависимости ионных токов

На основе анализа энергий появления ионов и температурных зависимостей ионных токов (рисунок 2) был сделан вывод о том, что единственным предшественником зарегистрированных ионов являются мономерные молекулы.

Температурная зависимость суммарного ионного тока позволила определить энтальпию сублимации DL-метионина:  $141 \pm 3$  кДж·моль<sup>-1</sup> при температуре 404 К.

*Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках Государственного задания (проект № FZZW-2020-0007)*

УДК: 544.478.1

Коршакова Анастасия Алексеевна

## **СЕЛЕКТИВНОЕ ГИДРИРОВАНИЕ ФЕНИЛАЦЕТИЛЕНА ДО СТИРОЛА В ПРИСУТСТВИИ ПОЛИМЕРНОГО ПАЛЛАДИЕВОГО КАТАЛИЗАТОРА**

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

Тверской государственной технической университет, г. Тверь  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Селективное гидрирование алкинов до алкенов с минимальным образованием алканов – важный процесс в агрохимической и нефтехимической промышленности. В частности, стирол (продукт селективного гидрирования фенилацетилена) применяется в качестве мономера в производстве полимеров. В промышленности стирол обычно получают переработкой пиролизного бензина. При этом важной является задача удаления примесей фенилацетилена, которую можно решить с помощью селективного гидрирования фенилацетилена с использованием гетерогенных катализаторов на основе палладия. Данный вариант является наиболее эффективным способом удаления фенилацетилена из стирола.

В рамках данной работы изучено влияние условий реакции на активность и селективность палладиевого катализатора в реакции гидрирования фенилацетилена до стирола. Гидрирование фенилацетилена до стирола проводилось с использованием катализатора 1%-Pd/MN100, полученного пропиткой полимера MN100 раствором ацетата палладия в тетрагидрофуране. В ходе гидрирования варьировали следующие параметры: нагрузку на катализатор, растворитель (толуол, этанол, 2-пропанол), температуру (90°C, 70°C или 65°C), степень окисления Pd (использовали, как восстановленный, так и невосстановленный катализатор). Также проводилась модификация катализатора соединениями щелочных металлов (Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> и K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>). Гидрирование проводили в периодическом режиме при атмосферном давлении водорода.

Было показано, что для обеспечения высокой селективности по отношению к стирулу гидрирование фенилацетилена предпочтительно проводить в толуоле при 90°C с невосстановленным катализатором при нагрузке на катализатор 5106 моль(фенилацетилена)/моль(Pd). Предварительная модификация катализатора 1%-Pd/MN100 раствором Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> позволила повысить селективность с 97,7% до 99,5% при конверсии фенилацетилена 95%. При использовании в качестве модификатора K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> селективность по отношению к стирулу также возросла и составила 98,5% при конверсии фенилацетилена 95%.

УДК: 577.12

Косивцов Георгий Юрьевич

## ПЕРЕРАБОТКА ТРЁХМЕРНЫХ БИОПОЛИМЕРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СУБКРИТИЧЕСКИХ ФЛЮИДОВ

Руководитель: В.П. Молчанов

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра физической химии

В последние годы в связи с высокой стоимостью сырой нефти население планеты более отчетливо начало осознавать ограниченность ископаемых ресурсов и проявлять усиливающееся стремление к обеспечению защиты и стабильности климата на Земле. При этом повышенный интерес начинают вызывать биополимеры, представляющие собой особый класс полимерных материалов [1].

Биополимеры могут вступать в реакцию с высокотемпературной водой за очень короткое время пребывания и с высокой скоростью превращения [2]. Изменения физических и химических свойств воды в районе ее критической точки делает возможным контроль равновесия реакции и скорости основных реакций путем регулирования температуры и давления, могут быть применены для преобразования биополимеров в желаемые продукты [3]. Различные цели могут быть достигнуты при обработке биополимеров с использованием сверхкритических флюидов. Модификации биополимеров и достижимые продукты разнообразны и могут быть изменены в значительной степени путем изменения условий эксплуатации с получением широкого спектра целевых продуктов [2].

Биополимеры применяются, как правило, в тех случаях, когда именно их биоразлагаемость является наиболее востребованным свойством. В качестве примеров можно назвать производство мульчирующей пленки или горшков для растений в сельском хозяйстве. Эти изделия после их использования не должны подвергаться сбору и транспортировке, а должны непосредственно сразу на местах их использования образовывать биомассу в почве [1].

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мырнин В.Н. Биополимеры: перспективы развития. Полимерные материалы: изделия, оборудование, технологии. 2013.
2. Rogalinski T., Liu K., Albrecht T., Brunner G. Hydrolysis kinetics of biopolymers in subcritical water. J. of Supercritical Fluids. 2008.
3. Siti Machmudah, Wahyudiono, Hideki Kanda, Motonobu Goto. Hydrolysis of Biopolymers in Near-Critical and Subcritical Water. Water Extraction of Bioactive Compounds. 2017.

УДК: 541.6: 542.91

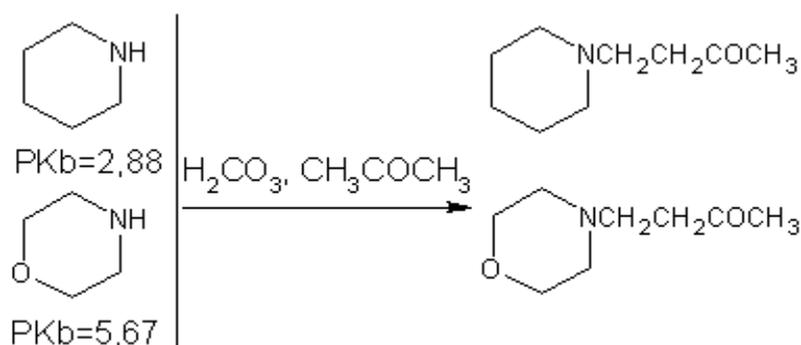
Костромина Арина Александровна

**ПОЛУЧЕНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ ПИПЕРИДИНА  
И МОРФОЛИНА ПО РЕАКЦИИ МАННИХА**

Руководитель: Л.И. Ворончихина

Тверской государственный университет  
Кафедра органической химии

Реакция Манниха имеет большое значение при синтезе ряда алкалоидов,  $\beta$ -ненасыщенных кетонов и  $\beta$ -дикарбонильных соединений. В настоящей работе реакция Манниха была использована нами для синтеза N-производных пиперидина и морфолина, содержащих в радикале карбонильную группу. Четвертичные соли таких производных, содержащих длинноцепочечные радикалы, могут представлять интерес как катионные ингибиторы коррозии металлов. Пиперидин и морфолин выбраны нами в качестве аминной компоненты для реакции Манниха в связи с тем, что как известно из литературы, их производные проявляют высокую физиологическую активность и используются в качестве анальгетиков, анестетиков, кроме того, они также входят в состав различных алкалоидов, таких как анабазин, морфин, бобелин, трофин и др. В качестве C-H кислотной компоненты применяли ацетон.



Реакцию Манниха проводили нагреванием смеси ацетона, формалина (35%) и хлоргидрата в течение 12 часов. Температура реакции не превышала  $50-60^\circ C$  из-за летучести формальдегида. На первой стадии реакции образуется хлоргидрат N-производного амина. Выход продукта 70-80%, после перекристаллизации из ацетона хлоргидраты представляли собой белые кристаллические вещества с четкой температурой плавления, хорошо растворимые в воде. Состав подтвержден совпадением температуры плавления с литературными данными.

Для получения свободного основания (2 стадия) хлоргидраты обрабатывали концентрированным раствором KOH при температуре  $5^\circ C$ , выделившееся масло отделяли, сушили и перегоняли в вакууме. Полученные соединения 1-пиперидинобутанон-3 ( $T_{кип} = 101^\circ/11$ ) и 1-морфолинобутанон-3 ( $116^\circ/20$ ) представляли собой бесцветные жидкости; температура кипения совпадает с литературными данными.

УДК: 530.135

Котомкин Алексей Викторович

## ЭНТАЛЬПИЯ ОБРАЗОВАНИЯ РАДИКАЛОВ ФТОРАЛКАНОВ

Руководители: Ю.Д. Орлов, В.В. Туровцев

Тверской государственный университет  
Кафедра общей физики

Стандартные энтальпии образования вещества из элементов ( $\Delta H_f^0$ ) найдены для очень малого числа фторсодержащих органических радикалов [1,2]. Это обусловлено сложностью экспериментов вследствие высокой реакционной способностью радикалов и коротким временем их жизни. **Целью** данной работы является расчет  $\Delta H_f^0$  радикалов монофторалканов.

Стандартные энтальпии образования радикалов  $FC^{\bullet}H_2$ ,  $FC_2H-(CH_2)_n - C^{\bullet}H_2$ ,  $FC^{\bullet}H-(CH_2)_n-CH_3$ , где  $0 \leq n \leq 3$  были получены в программе GAUSSIAN 03 [3] методом Gaussian-4 (G4) [4]. Алгоритм поиска описан в [5]. Разница между экспериментальными и рассчитанными величинами  $\Delta_f H^0$  (Таблица) составила 0,27 кДж/моль [1] для  $FC^{\bullet}H_2$ , -1,50 кДж/моль [2] для  $FC^{\bullet}H-CH_3$  и 2,64 кДж/моль для  $FC_2H-C^{\bullet}H_2$  [1]. Для остальных радикалов сравнение провести невозможно, так как экспериментальные данные отсутствуют.

Таблица.

Стандартные энтальпии образования  $\Delta H_f^0$  фтораллильных радикалов, в кДж/моль

Радикал	$\Delta_f H^0$	Радикал	$\Delta_f H^0$
$FC^{\bullet}H_2$	-32,08		
$FCH_2-C^{\bullet}H_2$	-62,09	$FC^{\bullet}H-CH_3$	-76,7
$FCH_2-CH_2-C^{\bullet}H_2$	-88,03	$FC^{\bullet}H-CH_2-CH_3$	-96,45
$FCH_2-(CH_2)_2-C^{\bullet}H_2$	-109,97	$FC^{\bullet}H-(CH_2)_2-CH_3$	-118,54
$FCH_2-(CH_2)_3-C^{\bullet}H_2$	-133,35	$FC^{\bullet}H-(CH_2)_3-CH_3$	-142,16

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Luo Y.-R. Comprehensive Handbook of Chemical Bond Energies – CRC Press, 2007. – 1667p.
2. Орлов Ю.Д., Лебедев Ю.А., Сайфулин И.Ш. Термохимия органических свободных радикалов – М.: Наука, 2001. – 304 с.
3. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 03 (Revision E 0.1 SMP). Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 2007.
4. Curtiss L.A., Redfern P.C. and Raghavachari K. Gaussian-4 theory, *J. Chem. Phys.*, 2007, **126**, 084108.
5. J.W. Ochterski Thermochemistry in Gaussian. Gaussian, Inc., 2000. (<https://gaussian.com/thermo/>).

Кравченко Виолетта Владимировна

## УПРАВЛЕНИЕ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРОЙ АКТИВИРОВАННОГО ВОДЯНЫМ ПАРОМ АНТРАЦИТА

Руководители: М.В. Савоськин, Н.В. Алемасова

Государственное учреждение «Институт физико-органической химии и углехимии  
им. Л.М. Литвиненко», г. Донецк, Украина  
Отдел супрамолекулярной химии

Производство активированного угля остается актуальным направлением нетопливного использования углей. Области применения получаемых активированных углей определяются характером их пористой структуры. Активировали антрацит для бытовых нужд населения г. Донецка ( $W^a - 1,4\%$ ;  $A^d - 7,1\%$ ;  $V^{daf} - 4,5\%$ ;  $S_t^d - 1,2\%$ ) и антрацит шахты «Шахтерская Глубокая» г. Шахтерска ( $W^a - 1,4\%$ ;  $A^d - 6,9\%$ ;  $V^{daf} - 2,3\%$ ;  $S_t^d - 0,60\%$ ). Проводили активацию в лабораторной установке кипящего слоя, активизирующим агентом выступал перегретый водяной пар.

По изменению значений йодного числа [1] и адсорбционной способности к парам бензола [2] судили о динамике образования микропор в полученных сорбентах. Адсорбционная способность активированного антрацита по метиленовому голубому [3] являлась качественным показателем формирования мезопор. Установлено, что увеличение температуры от 800 до 950°C и времени активации от 2 до 3 ч приводит к возрастанию количества микропор. Проведение активации в течение 4 ч не приводит к существенному изменению количества микропор. Повышение скорости подачи воды от 0,7 до 2 мл/мин способствует росту количества микро- и мезопор; при скорости подачи воды 2,7 мл/мин начинается процесс разрушения микропор, количество мезопор при этом остается неизменным.

Таким образом, варьируя скорость подачи воды, температуру и длительность активации можно управлять пористой структурой получаемого сорбента.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ГОСТ 33618-2015. Уголь активированный. Стандартный метод определения йодного числа. – М.: Стандартинформ, 2016. – 6 с.
2. Кельцев Н.В. Основы адсорбционной техники / Н.В. Кельцев. – М.: Химия. – 1984. – 592 с.
3. ГОСТ 4453-74. Уголь активный осветляющий древесный порошкообразный. Технические условия. – М.: Изд-во стандартов, 1993. – 21 с.

УДК: 548.735.4

Краснякова Ирина Олеговна

## ОЦЕНКА КОЛИЧЕСТВА ПРИМЕСНЫХ ФАЗ В $\text{BiFeO}_3$

Руководитель: А.Г. Рудская

Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону  
Физический факультет, кафедра «Нанотехнология»

С середины прошлого века сегнетоэлектрические оксиды со структурой перовскита привлекают большое внимание благодаря уникальным физико-химическим свойствам и широкому спектру практического применения. Ярким представителем этого класса соединений является феррит висмута  $\text{BiFeO}_3$ , который, как правило, синтезируют в ходе твердотельной реакции между  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  и  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  при высоких температурах. Однако, однофазный  $\text{BiFeO}_3$  получить этим методом практически невозможно [1]: обычно имеют место примесные фазы муллита  $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$  (висмута-дефицитная) и силленита  $\text{Bi}_{25}\text{FeO}_{40}$  (богатая висмутом). Могут также присутствовать остатки непрореагировавших прекурсоров. Оценить количественное содержание примесных фаз можно методом рентгенофазового анализа.

На дифрактограммах феррита висмута, полученного по стандартной керамической технологии двухстадийным синтезом (молярное соотношение  $\text{Bi}_2\text{O}_3:\text{Fe}_2\text{O}_3 = 1:1$ , температуры синтеза  $T_1 = T_2 = 850^\circ\text{C}$ ), присутствуют все рентгеновские максимумы, присущие  $\text{BiFeO}_3$  со структурой перовскита [2]. Кроме рефлексов основной фазы  $\text{BiFeO}_3$  наблюдаются пики, отвечающие примесным фазам силленита  $\text{Bi}_{25}\text{FeO}_{40}$  [3] и муллита  $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$  [4].

Рефлексы максимальной интенсивности, полученные от фаз, входящих в состав синтезированного образца, наблюдаются у  $\text{BiFeO}_3$  для семейства отражающих плоскостей (110) [2], у  $\text{Bi}_{25}\text{FeO}_{40}$  – от (310) [3] и у  $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$  – от (211) [4]. Экспериментально определенные из дифрактограммы абсолютные значения интегральных интенсивностей этих пиков составляют 1377, 77 и 50 имп/с соответственно. Эти значения позволяют провести грубую количественную оценку содержания примесных фаз в исследуемом образце, которая дает 5.1 % для  $\text{Bi}_{25}\text{FeO}_{40}$  и 3.3 % для  $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ .

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Денисов В.М. и др. // Journal of Siberian Federal University. Chemistry 2 (2012 5) 146.
2.  $\text{BiFeO}_3$ . PDF-2: ICDD, № 73-548.
3.  $\text{Bi}_{25}\text{FeO}_{40}$ . PDF-2: ICDD, № 46-416.
4.  $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ . PDF-2: ICDD, № 72-1832.

УДК: 541.6

Крылов Анатолий Анатольевич

**ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР С НЕПОСРЕДСТВЕННЫМ  
ОТСЧЕТОМ НА ОСНОВЕ ПОЛИ-1-НАФТИЛАМИНА**

Руководитель: В.Г. Алексеев

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Ранее было показано, что для плёнок поли-1-нафтиламина наблюдается электромеханический эффект, состоящий в изменении их геометрических размеров в процессе электрохимического окисления-восстановления. На электромеханические свойства плёнок влияют рН и допирующие ионы. В данной работе исследовалась возможность использования данных эффектов для создания потенциометрического сенсора на основе полупроводникового полимера. Для этого на платиновую подложку длиной 50 мм и шириной 2 мм методом ЦВА был нанесен слой поли-1-нафтиламина толщиной 0,3 мм. Исследования отклика полученного сенсора с использованием модельных смесей  $\text{Sn}^{2+}/\text{Sn}^{4+}$  и  $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}/\text{Cr}^{3+}$  и потенциометрического титрования, рис. 1. Контроль потенциала среды осуществлялся с иономере И-160 с использованием платинового и хлорсеребряного электродов.

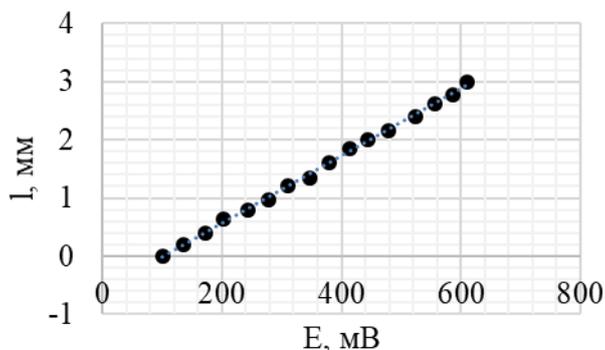


Рис. 1 Зависимость отклонения ЭХА  
от окислительно-восстановительного потенциала среды

Полученный сенсор обладает высокой химической стойкостью и не разрушается в процессе титрования. Единственным ограничением является превышение 600 мВ, из-за постепенного разрушения полимера.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Крылов А.А., Алексеев В.Г. Влияние допирующих анионов и рН среды на электромеханические свойства плёнок поли-0-толуидина и поли- $\alpha$ -нафтиламина // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. 2020. № 2 (40). С. 24-31.

УДК: 543.421; 543.424

Крюков Тимофей Владимирович

## ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДЫХ КОМПЛЕКСОВ ГАДОЛИНИЯ И ТЕРБИЯ С ЦЕФАЗОЛИНОМ МЕТОДОМ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ

Руководитель: М.А. Феофанова

Тверской государственной университет, г. Тверь  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Цефазолин – антибиотик цефалоспориновой группы относящийся к первому поколению, так же он является антибиотиком кислотного типа и содержит одну карбоксильную группу [1]. В медицине используется в виде натриевой соли NaCzl [2].

Для проведения эксперимента использовали натриевые соли цефазолина (NaCzl) производства компании «Деко» г. Москва. Комплексы были получены в виде осадков в результате взаимодействия в нейтральном водном растворе хлоридов церия и празеодима и натриевой соли цефазолина в мольном соотношении 1:3, затем были высушены на воздухе при комнатной температуре.

Взаимодействием водных растворов хлорида гадолиния и тербия и натриевой соли цефазолина (NaCzl) были получены и выделены в твердом виде комплексы цефазолина. Полученные соединения исследованы методом ИК-спектроскопии.

Таблица

Данные ИК-спектроскопии

Образец	Отнесение колебаний		
	$\nu(\text{C}=\text{O})$ Амид	$\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)$ (асимм)	$\nu(\text{C}(\text{O})\text{O}^-)$ (симм)
NaCzl	1668	1601	1389
GdCzl	1682	1602	1426
TbCzl	1685	1604	1425

Исследование полученных образцов методом ИК-спектроскопии показало, что в процессе получения комплексов химическая структура антибиотиков не претерпела изменений, так как ИК-спектры комплексов и соответствующей натриевой соли схожи между собой. При этом отмечается смещение полос поглощения валентных колебаний  $-\text{C}=\text{O}$  бета-лактамой и амидной  $-\text{C}=\text{O}$ , что можно расценивать как координацию этих групп с трехвалентными ионами этих металлов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алексеев В.Г. // Хим.-фарм. журн. 2010. Т.44, № 1. С. 16–26.
2. Машковский М.Д. Лекарственные средства. 16-е изд., перераб., испр. и доп. М.: Новая волна, 2012. 1216 с.

УДК: 547.556.9

Кудряшова Елена Андреевна

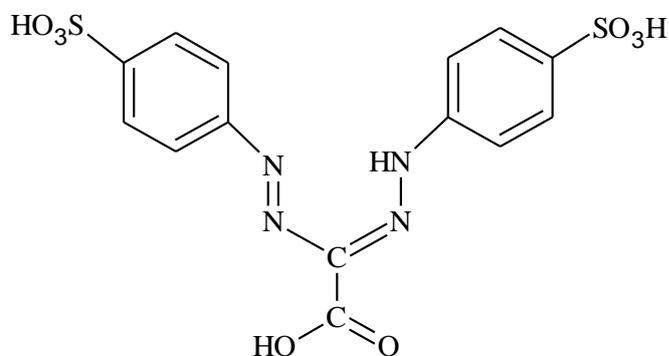
**ПОЛУЧЕНИЕ АЗОГИДРАЗОНОВ  
НА ОСНОВЕ ПРОПАНДИОВОЙ КИСЛОТЫ**

Руководитель: И.Ю. Егорова

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра органической химии

Азогидразоны муравьиной кислоты – формазаны, содержат структурный фрагмент, в котором  $\pi$ -электроны кратной связи и  $p$ -электроны неподеленной пары атомов азота обуславливают донорные свойства и их способность образовывать различные производные: металлокомплексы, фотохромные формазаны и с фармакофорными группами, формазансодержащие полимеры, красители и др. Формазаны широко применяются как комплексообразователи, используются при изучении ферментативных процессов в клетках. Образуют с ионами переходных металлов ярко окрашенные хелатные комплексы, которые применяются как свето- и термостойкие красители для полиэфирных и полиамидных волокон, а также шерсти. Представленная работа посвящена получению азогидразонов на основе пропандиовой кислоты.

Методом синтеза формазанов является реакция азосочетания арилдиазониевых солей с гидразонами альдегидов и  $\alpha$ -кетокислот (в последнем случае диазосочетание сопровождается декарбоксилированием). Вариацией этого метода является азосочетание арилдиазониевых солей с соединениями, содержащими активированную электроакцепторными заместителями метиленовую группу, при этом на начальном этапе диазотирования образуются соответствующие гидразоны, далее диазотирующиеся с потерей уходящей группы до формазанов. В данной работе взаимодействием сульфанилдиазония хлорида с пропандиовой (малоновой) кислотой получен 1,5-сульфанил-3-карбоксиазогидразон.



Определены температура плавления и растворимость полученного соединения, с помощью ИК-спектроскопического анализа подтверждено строение полученного азогидразона.

УДК: 53.087.9

Куров Антон Геннадьевич

## РАЗРАБОТКА МОДУЛЯ УДАЛЕННОГО УПРАВЛЕНИЯ НА SIM800С

Руководитель: В.В. Макаров

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра общей физики

Быстрое развитие Интернета Вещей (Internet Of Things, IoT) было обусловлено продолжающимся удешевлением технологий. Последние пару лет можно непрерывно наблюдать, как снижается стоимость самых различных устройств, начиная от 3D-принтеров и заканчивая умными часами.

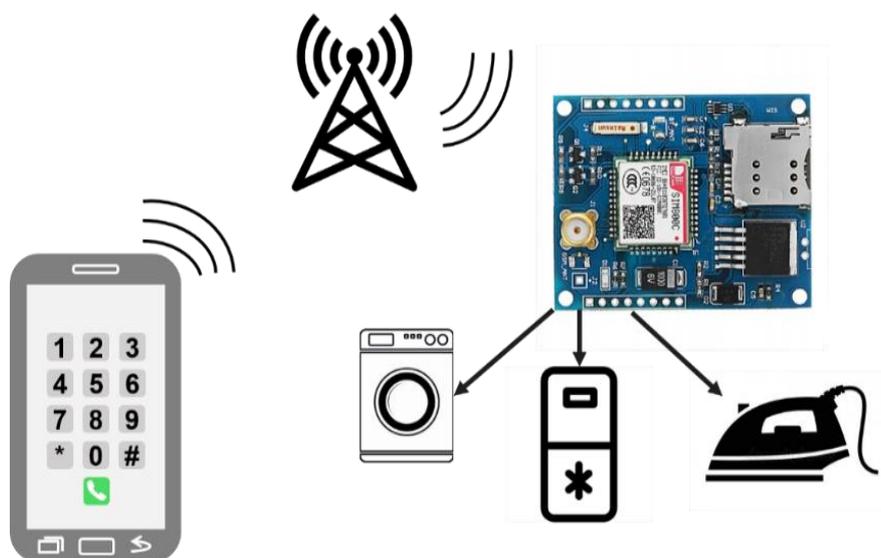


Рис. 1. IoT (Internet of Things) – Интернет вещей

Модуль SIM800С – миниатюрный модуль стандарта 850/900/1800/-1900МГц. Модуль предоставляет доступ к сетям GSM и GPRS для осуществления голосовых вызовов, управления посредством DTMF-команд, отправки и приема SMS-сообщений, обмена цифровыми данными.

Свое применение модуль находит в составе сложных систем: охранная и пожарная сигнализация, GPS-трекеры, система «умный дом», Internet of Things, промышленная автоматика, карманные персональные компьютеры и др.

В данной работе был разработан модуль дистанционного управления в системах мониторинга (контроля) состояния ВОЛС. Проблема становится особо актуальной, т. к. в процессе эксплуатации ВОЛС необходимо обеспечивать нужный уровень обслуживания и максимально оперативно устранять аварийные ситуации.

УДК: 544.169

Курочкин Георгий Александрович

**ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ДИМЕРОВ ПИРРОЛА**

Руководители: Н.П. Русакова, В.В. Туровцев

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Полипиррол широко используется в качестве изоляционного материала, однако его окисленная форма является хорошим электрическим проводником. В качестве мономеров пиррол и его производные входят в состав различных сложных веществ, дополняя или изменяя их физико-химические параметры и т.д. Это требует более детального исследования некоторых свойств соединений пиррола (н.п., электронных), которые удобнее проводить в постулатах квантовой химии.

Димеры пиррола - I, II, III (Рис.) оптимизированы методом ВЗЛУР в программе Gaussian03. Заряды атомов получены в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» с помощью AIMALL, суммированы в заряды групп -  $q(R)$  и сведены в таблицу (Таблица).

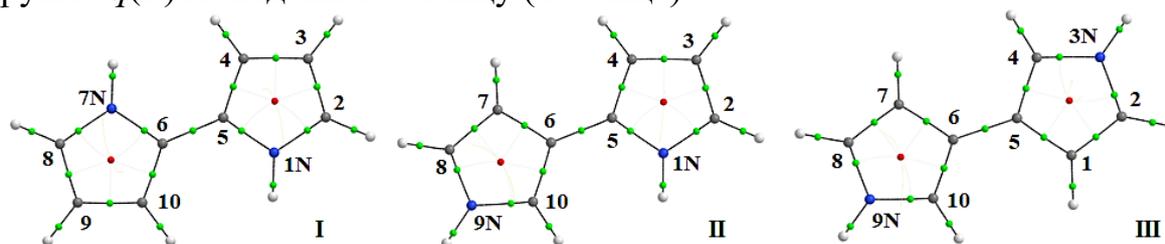


Рис. Оптимизированные молекулы димеров пиррола:  $\alpha\alpha'$ -дипиррол – соединение I,  $\alpha\beta$ -дипиррол – соединение II,  $\beta\beta'$ -дипиррол – соединение III; показаны ядра атомов, их нумерация в циклах, критические точки (3; -1) и (3; +1)

Рассмотренные димеры отличаются расположением групп NH относительно связи С-С, соединяющей ароматические кольца (Рис). Обладая отрицательной величиной  $q(R)$ , NH проявляет индуктивный эффект на ближайшие СН и С, стягивая с них электронную плотность в свой атомный бассейн, это сопровождается увеличением  $q(\text{CH})$  и  $q(\text{C})$  (Таблица). Понижение  $q(\text{NH})$  в молекулах от I к III связано с увеличением расстояния между ядрами ( $R_n$ ) азота. Для первого димера  $R_{n(\text{I})} = 3,69 \text{ \AA}$ , во втором - оно  $R_{n(\text{II})} = 4,37 \text{ \AA}$ , а в третьем -  $R_{n(\text{III})} = 5,86 \text{ \AA}$ . Увеличение  $R_n$  приводит к уменьшению взаимного влияния NH и снижению их  $q(\text{NH})$ .

Таблица: Заряды групп ( $q(R)$ ) С, СН, NH молекул I, II, III, в а.е.\*

Группа	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
I	-0,789	0,405	0,011	-0,020	0,393	0,393	-0,789	0,405	0,011	-0,020
II	-0,802	0,391	0,001	-0,006	0,386	0,019	0,017	0,410	-0,803	0,386
III	-0,006	0,401	-0,809	0,396	0,019	0,019	-0,006	0,401	-0,809	0,396

\*В затемненных ячейках выделены параметры азотосодержащих групп NH, нумерация групп соответствует Рис.

УДК: 620.197.3

Лапшина Наталия Андреевна

## СИНТЕЗ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ ТРИФЕНИЛФОСФОНИЯ

Руководитель: Л. И. Ворончихина

Тверской государственной университет  
Кафедра органической химии

В настоящее время четвертичные соединения азота и фосфора нашли очень широкое практическое применение во всех сферах жизни человека. Широко используются и продолжают изучаться дезинфицирующие способности этих соединений. Четвертичные соединения фосфора применяются в качестве высокоэффективных эмульгаторов, диспергаторов, ингибиторов коррозии.

Соединения фосфора обладают большей термической стабильностью по сравнению с аналогичными солями аммония. В последнее время продолжает возрастать спрос на изучение новых и исследование уже давно полученных четвертичных соединений.

В настоящей работе синтезированы четвертичные соли фосфония на основе трифенилфосфина и галоидных алкилов: бутил бромистый, бензил хлористый и цетил йодистый. Исследованы их физико-химические свойства и термическая стабильность. Реакция получения четвертичных солей аммония - это типичный пример реакции нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода,  $S_N2$ .

Строение солей фосфония подтверждено данными ИК-спектроскопии ( $\nu(\text{P}-\text{C}_6\text{H}_5 \text{ P}-\text{C}_{\text{ar}})$   $\nu$  1450-1435  $\text{cm}^{-1}$ ).

Установлено, что соли фосфония более реакционноспособные и выход в 1,2 раза выше по сравнению с выходами солей аммония.

По данным термогравиметрического анализа установлено, что соли фосфония более термически устойчивы и начинают разлагаться при 250°C, в то время как соли аммония устойчивы до 200°C.

Реакцией метатезиса соли фосфония с тетрафторборатом натрия в водной среде получили бутилтрифенилфосфоний тетрафторборат, с выходом 75%.

УДК: 544.169

Ларионова Ольга

## КОРРОЗИОННОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ ДИФЕНИЛЬНОЙ СМЕСИ НА МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ КОНСТРУКЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ: МЕДЬ, ПРИПОЙ, ЛАТУНЬ, СТАЛЬ, ЧУГУН, АЛЮМИНИЙ

Руководитель: М.А.Феофанова

Тверской государственный университет  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Дифенильная смесь (дифил) – эвтектическая азеотропная смесь дифенилоксида (73 %) и дифенила (27%). Данная смесь используется как высокотемпературный органический теплоноситель (ВОТ), так как отличается хорошими физико-химическими показателями: низкой вязкостью, высокой плотностью (по сравнению с гидрогенизированными терфенилами), широким рабочим диапазоном температур и т. д.

Целью работы было исследование коррозионного воздействия ВОТ на образцы металлов. По ГОСТу ISO 2160-2013 и ГОСТу 32329-2013 определяется коррозионное воздействие высокотемпературных жидкостей только на медную пластинку, поэтому было решено взять за основу ГОСТ 28084-89 и изменить условия эксперимента под высокотемпературные жидкости.

Суть эксперимента: в испытываемую жидкость (дифенильную смесь) были помещены образцы металлов, определенной массы и определенных размеров, выдержаны при заданной температуре (170 °С) установленное количество времени (14 суток), после этого образцы металлов были промыты и взвешены. Затем был произведен сравнительный анализ внешнего вида образцов до и после эксперимента, вычислено коррозионное воздействие с помощью имеющихся данных.

Таблица

Данные эксперимента «Коррозионное воздействие»

Образец металла	$m_{до}$ , Г	$m_{после}$ , Г	Длина l, мм	Ширина a, мм	Толщина b, мм	Коррозионное воздействие $\gamma$ , г/(м <sup>2</sup> *сут)
Медь	14,7678	14,7651	49,45	25,05	1,45	0,071601
Припой	29,0253	29,0156	56,55	23,6	2,6	0,224521
Латунь	14,1688	14,1679	50	24,85	1,45	0,023791
Сталь	12,6488	12,6482	50,35	26,75	1,3	0,014808
Чугун	36,0829	36,0823	54,4	27,15	3,8	0,011992
Алюминий	8,4921	8,4914	49,2	25,15	2,8	0,017294

По ГОСТу 28084-89 коррозионные потери для припоя не должны превышать 0,2 г/(м<sup>2</sup>\*сут), для остальных металлов – 0,1 г/(м<sup>2</sup>\*сут). Учитывая эти значения, можно предположить, что дифенильная смесь безопасна для данных металлов.

УДК: 628.473.45

Лебедева Ирина Евгеньевна

## КОМПОСТИРОВАНИЕ ОТХОДОВ ПЕРЕРАБОТКИ ЛЬНА

Руководитель: Е.В. Ожимкова

Тверской государственной технической университет, г. Тверь  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Компостирование представляет собой аэробный процесс твердофазной ферментации растительных отходов с помощью микроорганизмов, посредством которого различные органические вещества превращаются в более стабильные соединения. Полученные компосты способствуют улучшению физических, химических и микробиологических свойств почвы [1]. Наиболее важными параметрами для компостирования являются: влажность (рекомендуемые значения 50-65 %), соотношение С / N (25-35), концентрация кислорода, уровень рН (6,5-8,0), температура (40-65°C) [1].

В данной работе проведено исследование компостирования основных отходов переработки льна - костры и половы (остатки коробочек после обмола семян). Костра представляет собой одревесневшие части стебля льна, в виде мелкой соломки, остающейся после трепания льна [2]. Плод льна - это коробочка из пяти гнезд, каждое из которых подразделяется на полугнезда [2].

Компосты готовились при соотношениях источника азота и углерода 1:5; 1:6; 1:8. При составлении смесей для компостирования в качестве источника углерода использовались отходы переработки льна, в качестве источника азота - крапива. Для компостирования применялось микробиологическое удобрение «Байкал ЭМ-1» с концентрацией 1:200 к исходному концентрату. Для интенсификации процесса компостирования на растительное сырье предварительно воздействовали низкочастотным ультразвуком (30 кГц). У всех полученных компостов определяли содержание гуминовых кислот, влажность, температуру и рН.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sanchez, O. Compost supplementation with nutrients and microorganisms in composting process / O. Sanchez, D. Ospina, S. Montoya // Elsevier. - 2017. - № 9. – С.136-153.
2. Синицын, А.П. Биоконверсия лигноцеллюлозных материалов / А.П. Синицын, А.В. Гусаков, В.М. Черноглазов. - М.: Изд-во МГУ, 2010. - 224 с.

УДК: 541.64:546.57

Левчукова Валентина Александровна

## МАКРОПОРИСТЫЕ КРИОГЕЛИ И ПЛЕНКИ НА ОСНОВЕ L-ЦИСТЕИН/AgNO<sub>3</sub>/ПВС СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОЙ СИСТЕМЫ

Руководители: Д.В. Вишневецкий, Я.В. Андрианова

Тверской государственный университет, Тверь, Россия

Кафедра физической химии

В настоящей работе синтезированы гели на основе L-цистеина, нитрата серебра и поливинилового спирта (ММ = 50 и 100 кДа, 99%). Сначала был приготовлен цистеин-серебряный водный раствор (ЦСР) [1]. Далее, к созревшему в течение 24 ч. ЦСР прибавляли ПВС и варьировали его концентрацию: 0.002, 0.01, 0.02, 0.1, 0.25, 0.5, 0.75, 1, 1.25, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4.0 % масс. в конечной смеси. Далее к смеси добавляли Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> (0.0001 % масс. в конечной смеси) в качестве инициатора гелеобразования. Часть гелей была высушена при 25 °С и получены тонкие пленки. Другая была заморожена при -18 °С, после 24 ч. разморожена. Водно-гелевые массы были отцентрифугированы (6 тыс. об/мин, 30 мин.), вода декантирована. Итоговые криогели нанесены на подложку и высушены при 25 °С и получены пленки.

Методом УФ-спектроскопии и динамического рассеяния света выяснено, что вода, декантированная после центрифугирования, не содержит примесей L-цистеин/AgNO<sub>3</sub> супрамолекулярной системы. Методом УФ- и ИК-спектроскопии показано, что L-цистеин/AgNO<sub>3</sub> супрамолекулярная система сохраняет свою нативную структуру в полученных пленках. Методом сканирующей электронной микроскопии изучена морфология пленок. Показано, что на образование макропористых структур и размеры пор оказывает влияние концентрация и молекулярная масса ПВС, что также независимо подтверждается данными ИК-спектроскопии. Методом элементного анализа установлено, что содержание серебра и серы в объеме пленок отличается от их содержания на поверхности, что подтверждает стабильность супрамолекулярной системы в матрице ПВС.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки Российской Федерации, Совета по грантам Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых (СП-80.2019.4) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.*

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Khizhnyak S.D., Komarov P.V., Ovchinnikov M.M., Zherenkova L.V., Pakhomov P.M. Mechanism of gelation in low-concentration aqueous solutions of silver nitrate with L-cysteine and its derivatives // Soft Matter. - 2017. - V.30. - №13. - P.5168-5184.

УДК: 662.613.11

Легочева Елизавета Сергеевна

## МАГНИТНАЯ СЕПАРАЦИЯ ЗОЛОШЛАКОВЫХ ОТХОДОВ С ВЫДЕЛЕНИЕМ ЦЕННЫХ КОМПОНЕНТОВ

Руководитель: А.В. Тихомирова

Кузбасский государственный технический университет  
имени Т.Ф. Горбачева, г. Кемерово

Кафедра химии, технологии неорганических веществ и наноматериалов

Если рассматривать структуру потребления первичных энергоресурсов по Н.П. Лаверову в Российской Федерации, то на первом месте окажется природный газ (52%), затем нефть (23%), а уголь занимает только третью позицию (19%) Однако, во многих регионах РФ даже несмотря на то, что при сжигании угля образуется большое количество твёрдых отходов (золошлаковых отходов – ЗШО), в условиях недостаточной газификации, при долгом зимнем периоде, он является наиболее доступным тепло- и энергоносителем.

Вместе с тем, ЗШО являются многокомпонентной системой, содержащей соединения, которые можно использовать не только в строительстве, а посредством последовательного разделения, выделять ценные компоненты вроде и редких, рассеянных редкоземельных элементов, которые присутствуют в минеральной части углей, а их содержание в золах достигает промышленно значимых концентраций [1]. Целью данной работы являлось выделение магнитной фракции золы уноса одного из предприятий Кемеровской области.

По результатам магнитной сепарации угольной золы массой 207,7 г., выделено всего 3,4 г магнитной фракции, что соответствует всего 1,6%. Согласно предварительно определённой составу золы уноса, предполагается, что магнитная фракция обязательно содержит ферромагнетики, такие как железо, кобальт и никель. Кроме того, если говорить о редкоземельных элементах, то среди присутствующих в составе золы, такими свойствами обладают гадолиний, тербий, гольмий, эрбий. Следующим этапом данной работы будет подробное изучение состава магнитной фракции золы уноса.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Черкасова Т.Г. Угольные отходы как сырьё для получения редких и рассеянных элементов / Черкасова Т.Г., Черкасова Е.В., Тихомирова А.В., Бобровникова А.А., Неведров А.В., Папин А.В./ Вестник КузГТУ. №6. 2016. с 185-188.

УДК: 548.5

Леончук Сергей Сергеевич

## **ВЛИЯНИЕ ЛЕЦИТИНА НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ КАРБОНАТА КАЛЬЦИЯ В ЖЕЛЧИ**

Научный руководитель: О.А. Голованова

ФГБОУ ВО «Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского», г. Омск  
Химический факультет, кафедра неорганической химии

Карбонат кальция – соединение, которое широко распространено в природе и имеет очень важное значение в процессах патогенной кристаллизации в организме человека, в частности, в процессе формирования желчных камней [1].

Важным компонентом желчи человека является лецитин (L- $\alpha$ -фосфатидилхолин) – один из важнейших для живых организмов фосфолипидов. В желчи это вещество (амфифильное ПАВ) выполняет стабилизирующую функцию, образуя вместе с молекулами солей желчных кислот мицеллы и везикулы, солюбилизирующие нерастворимый в воде холестерин – еще один важный компонент желчи и часто главный компонент холелитов. Очевидно, что концентрация лецитина в желчи влияет на её устойчивость как коллоидной системы, что, в свою очередь, может определять саму возможность образования холестериновых желчных камней. При этом кристаллизация холестерина может происходить лишь на уже сформированных зародышах кристаллизации – кристаллах карбоната и билирубината кальция [2].

В данной работе проводится исследование влияния лецитина на состав карбоната кальция, сформированного при осаждении его из модельного раствора желчи. Проведен синтез двенадцати образцов  $\text{CaCO}_3$  при варьировании концентрации лецитина и состава модельной желчи [3].

С помощью методов рентгенофазового анализа (РФА), ИК-Фурье-спектроскопии (ИКС) и оптической микроскопии (ОМ) установлено, что лецитин в малых концентрациях в водных растворах и в желчи стабилизирует образование метастабильных кристаллических модификаций карбоната кальция (ватерита и арагонита); при этом увеличение концентрации лецитина приводит к ингибированию процесса кристаллизации  $\text{CaCO}_3$ .

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Голованова О. А., Леончук С. С. // Вестник ОмГУ. 2019. Т. 24. № 2. С. 66-73.
2. Тихонов Д. Г. // Якутский медицинский журнал. 2015. № 4. С. 91–96.
3. Голованова О. А., Леончук С. С. // Вестник НовГУ. 2020. Т. 121. № 5. С. 78-82.

УДК: 543.422

Лимонова Наталья Николаевна

**ПРОЦЕССЫ САМОСБОРКИ  
В НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ РАСТВОРАХ  
НА ОСНОВЕ ГЛИЦИНА**

Руководитель: С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Молекулярная самосборка как способ создания новых супрамолекулярных структур регулируется слабыми нековалентными взаимодействиями: водородными связями, электростатическими взаимодействиями, силами Ван-дер-Ваальса. В результате ассоциации (самоорганизации) структурных единиц (молекул, мономерных единиц) возникают наноструктуры, приобретающие все большее значение в нанотехнологии. Цель работы – сравнительный анализ процессов самосборки в водных растворах аминокислоты глицин, нитрата серебра и водорастворимых полимеров.

Объектами исследования были низкоконцентрированные системы с различным содержанием исходных компонентов, приготовленные на основе водных растворов глицина (Gly), нитрата серебра ( $\text{AgNO}_3$ ) и поливинилового спирта (ПВС). Процесс образования наноагрегатов в образцах с различным составом изучали с помощью метода динамического светорассеяния (ДСР) на приборе “Zetasizer NanoZS” в конфигурации обратного рассеяния при различных температурах.

Результаты, полученные для различных водных систем: Gly, Gly- $\text{AgNO}_3$ , Gly-ПВС, Gly- $\text{AgNO}_3$ -ПВС – свидетельствуют о формировании наноассоциатов, размеры которых зависят от композиционного состава образцов и концентрации компонентов. Установлено, что добавление в исследуемую систему (Gly, Gly- $\text{AgNO}_3$ ) раствора полимера приводит к заметному уменьшению размеров агрегатов и к увеличению их стабильности во времени. Таким образом, изучение модельных систем на основе простейшей аминокислоты, соли серебра и полимеров методом ДСР позволит интерпретировать иерархию процессов самосборки.

*Работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии ЦКП ТвГУ.*

УДК: 547.022

Лусина Ольга Валерьевна

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОДУКТОВ ОКИСЛЕНИЯ *L*-ЦИСТЕИНА МЕТОДОМ ЯМР-СПЕКТРОСКОПИИ

Руководитель: Т.В. Берестова

Башкирский государственный университет  
Кафедра физической химии и химической экологии

*L*-цистеин принимает активное участие в обратимой окислительной модификации, которая регулирует важные пути клеточной трансдукции сигнала [1]. В связи с этим, изучение механизма реакции окисления *L*-цистеина может поспособствовать лучшему изучению окислительных процессов в организме.

В данной работе, методом ЯМР-спектроскопии изучены продукты окисления *L*-цистеина (1). Установлены химические сдвиги (рН~9, таблица) и частоты *L*-цистина (2), *L*-цистеинсульфата (5), *L*-цистеинсульфеновой (3) и *L*-цистеинсульфиновой (4) кислот.

Таблица

Соединение	$\delta^1\text{H}$ -ЯМР		$\delta^{13}\text{C}$ -ЯМР		
	<i>СНН</i>	$\text{СН}_2\text{СНСООН}$	$\text{C}_1$	$\text{C}_2$	$\text{C}_3$
<i>L</i> -cysH (1)	3.06 dd,	3.93 dd	25.45	56.47	172.85
<i>L</i> -cys <sub>2</sub> (2)	3.08 dd, 3.28 dd	3.83 dd	42.06	54.61	178.64
<i>L</i> -cysOH (3)	2.89 dd, 3.05 dd	4.20 dd	35.55	47.91	173.00
<i>L</i> -cysO <sub>2</sub> H (4)	3.39 dd, 3.56 dd	3.93 dd	49.37	53.03	178.93
<i>L</i> -cysSO <sub>3</sub> H (5)	3.18 dd, 3.38 dd	4.10 dd	34.92	53.41	172.67

Структура полученных соединений доказана с применением встречного синтеза *L*-цистеинсульфата [2] и *L*-цистеинсульфеновой кислот [3].

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Reddie K. G., Carroll K. S. Expanding the functional diversity of proteins through cysteine oxidation. *Curr. Opin. Chem. Biol.* 2008, 12, 746–754.
2. Zecchini M., Lucas R., Gresley A. L. New Insights into the Cystine-Sulfite Reaction. *Molecules.* 2019, 24, 2377.
3. Darkwa J., Olojo R., Chikwana E., Simoyi R.H. Antioxidant Chemistry: Oxidation of *L*-Cysteine and Its Metabolites by Chlorite and Chlorine Dioxide // *J. Phys. Chem.* 2004, №. 108. p. 5576–5587.

УДК: 621.7.08

Луцай Александр Валерьевич

## **АЛГОРИТМ КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ И ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ТОЧНОСТИ И НАДЁЖНОСТИ ОТСЛЕЖИВАНИЯ ПЕРЕМЕЩЕНИЙ НА СТАНКАХ С ЧПУ**

Руководитель: А.А. Репин

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра общей физики

Станки ЧПУ являются основой современного производства в любой отрасли. Большинство таких станков не имеют качественной обратной связи, позволяющей следить за правильностью его движений.

Использование алгоритмов компьютерного зрения совместно с промышленной камерой для определения перемещения камеры в пространстве является одним из вариантов решения данной проблемы [1].

В данном проекте камера имеет возможность поточного захвата кадра с периодом 4 мс. Разработанный алгоритм позволяет отслеживать перемещения с разрешением до  $5 \cdot 10^{-7}$  м, но со временем накапливается ошибка, связанная с особенностями работы алгоритма отслеживания. И без дополнительной обработки точность очень сильно зависит от времени работы. Использование математической модели, описывающей работу станка, может повысить эффективность [2].

Для увеличения точности была разработана математическая модель фрезерной платформы, которая учитывает физические процессы, данные, полученные в результате работы алгоритмов компьютерного зрения, а также команды, подаваемые на станок. Данная модель, применяется совместно с программным фильтром на основе Unscented Kalman Filter for Nonlinear Estimation [3], позволяющим использовать нелинейную модель, учитывающую команды. В итоге удалось практически избавиться от накопительной ошибки и значительно повысить точность.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Szeliski, R., 2010. Computer Vision: Algorithms and Applications (Texts in Computer Science) 2011th Edition. New York: Springer London Dordrecht Heidelberg, P. 87-180.
2. Sato R. Mathematical Model of a CNC Rotary Table Driven by a Worm Gear // International Journal of Intelligent Mechatronics and Robotics. Kobe Japan: IGI Global, 2012. P. 27-40.
3. Eric A. Wan, Merwe R. The Unscented Kalman Filter for Nonlinear Estimation // Adaptive Systems for Signal Processing, Communications, and Control Symposium 2000. ASPCC. The IEEE 2000. P. 1-6.

УДК: 543.245

Макарова Екатерина Андреевна

**КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ  $Fe^{2+}$  И  $Ni^{2+}$   
ПРИ СОВМЕСТНОМ ПРИСУТСТВИИ**

Руководитель: М.В. Минина

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра неорганической и аналитической химии

В настоящее время анализ содержания металлов, в том числе железа и никеля, находит широкое применение. Эти металлы входят в состав многих сплавов, содержатся в горных рудах и почвах. Поэтому часто возникает необходимость определения их при совместном присутствии.

Количественное определение  $Fe^{2+}$  и  $Ni^{2+}$  при совместном присутствии проводилось методом комплексометрического титрования трилоном Б. Исходная модельная смесь подвергалась воздействию  $HNO_3$  при нагревании. При этом  $Fe^{2+}$  окислялось до  $Fe^{3+}$ , добавлялся  $NH_4OH$  до  $pH = 1,5-2$ . Титрование проводилось трилоном Б в присутствии сульфосалициловой кислоты. В этом случае определяется содержание ионов  $Fe^{3+}$ , которому эквивалентно количество  $Fe^{2+}$ . После этого для устранения влияния ионов  $Fe^{3+}$  на определение  $Ni^{2+}$ , проводилось маскирование  $Fe^{3+}$  с помощью фторид-ионов. Далее комплексометрически определялось содержание  $Ni^{2+}$ . Титрование проводилось раствором трилона Б при  $pH = 9,5-10$  в присутствии индикатора – мурексида.

Для подтверждения возможности использования предложенной методики определения  $Fe^{2+}$  и  $Ni^{2+}$  при совместном присутствии в растворе был проведен соответствующий эксперимент, результаты которого представлены в таблице 1.

Таблица 1

Результаты определения  $Fe^{2+}$  и  $Ni^{2+}$  в модельной смеси  
методом комплексометрического титрования

Ион	Объем иссл. р-ра, мл	С трилона Б, моль/л	Объем трилона Б, пошедшего на титрование, мл	С, моль/л	Взято, моль	Найдено, моль
$Fe^{2+}$	10,00	0,05	1,06	0,0053	$5,00 \cdot 10^{-5}$	$4,90 \cdot 10^{-5}$
$Ni^{2+}$	10,00		10,04	0,0502	$5,00 \cdot 10^{-4}$	$5,01 \cdot 10^{-4}$

Из полученных результатов видно, что взятые и найденные значения количества вещества находятся в хорошем соответствии, следовательно, предложенную методику можно использовать на практике.

УДК: 544.77.051

Малышев Максим Дмитриевич

## ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОГО РАСТВОРА

Руководитель: П.В. Комаров

Тверской государственный университет, Тверь  
Кафедра физической химии

Актуальность исследования супрамолекулярных гидрогелей (СГГ) обусловлена их широким применением в повседневной практике и технологических процессах. СГГ представляют собой системы, образованные за счет множественных межмолекулярных связей, благодаря чему они способны менять и восстанавливать свою структуру при изменении внешнего воздействия, что позволяет рассматривать их как перспективную основу для «интеллектуальных» материалов.

В докладе обсуждаются вопросы, связанные с разработкой теоретической модели способной прогнозировать морфологию супрамолекулярных гидрогелей на основе серосодержащих аминокислот, что является важной фундаментальной задачей, имеющей тесную взаимосвязь с широким практическим применением. В качестве реперной системы мы используем цистеин-серебряный раствор (ЦСР) способный к желированию при низких концентрациях дисперсной фазы после добавления солей. Простота данной системы и накопленный большой объем экспериментальных данных делает ее удобной для теоретического рассмотрения с точки зрения изучения механизмов самосборки супрамолекулярных систем.

Построение мезомасштабной модели структурообразования ЦСР осуществлялось с использованием последовательного подхода, что позволило учитывать особенности молекулярного и надмолекулярного уровней исследуемой системы. В качестве ключевого параметра, оказывающего непосредственное влияние на морфологию формирующихся структур и поведение системы в целом, являлась концентрация соли  $k$ . Варьируя значения параметра  $k$  удалось воспроизвести основные особенности процесса созревания, гелеобразования и коагуляции ЦСР.

*Работа выполнена с использованием вычислительных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСЦ РАН). Автор также выражает благодарность П.В. Комарову (ИНЭОС РАН, ТвГУ), П.М. Пахомову (ТвГУ) и С.Д. Хижняку (ТвГУ) за обсуждение результатов и ценные советы.*

УДК: 541.141; 141.2

Малышев Максим Дмитриевич

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СМЕСЕЙ РВТТТ/РС61ВМ: ДИССИПАТИВНАЯ ДИНАМИКА ЧАСТИЦ**

Руководитель: П.В. Комаров

Тверской государственный университет, Тверь  
Кафедра физической химии

Предполагается, что в смесях полимеров с достаточно большим расстоянием между боковыми группами, наполненных фуллеренами, могут формироваться сокристаллы (см. рисунок 1а), которые могут обладать высокой стабильностью и выдерживать многократное повторение циклов нагрева/охлаждение. Мы ожидаем, что выявление условий формирования сокристаллов в смесях сопряженных полимеров с фуллеренами может значительно повысить длительность работы фотоэлементов на основе полимеров благодаря образованию стерически стабилизированных структур.

В докладе обсуждается мезомасштабное моделирование смеси поли-(2,5-бис (3-гексадецилтиофен-2-ил) тиено-[3,2-б] тиофена) (РВТТТ) с модифицированными фуллеренами РС61ВМ и РС71ВМ, выполненное в рамках метода диссипативной динамики частиц (см. рисунок 1б,в). В качестве реперной системы мы используем крупнозернистую модель смеси РЗНТ/РС61ВМ. В качестве главного параметра модели мы выбрали отношение объемных долей полимер/фуллерены. Дополнительно выполнено варьирование параметра растворимости основной цепи, боковых цепей и функциональной группы фуллерена, для проверки влияния ошибки в определении этих параметров на эволюцию смеси. На рисунке 1г показан пример одной из построенных конфигураций изучаемой системы.

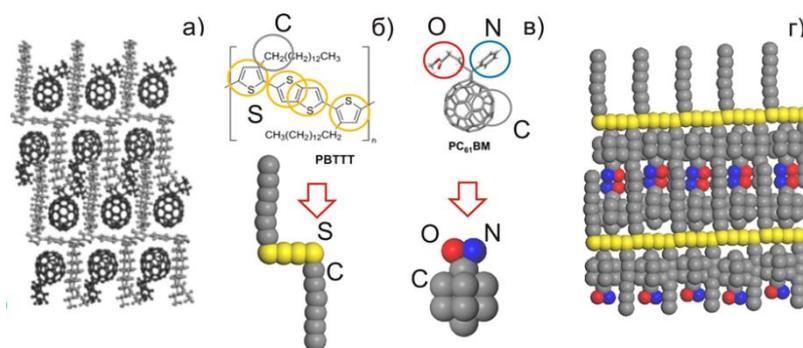


Рисунок 1. а) Структура бимолекулярного сокристалла РВТТТ/РСВМ, б) химическая структура РВТТТ и крупнозернистое представление мономерного звена, в) модифицированный фуллерен РС61ВМ и его крупнозернистое представление, г) крупнозернистая модель бимолекулярного сокристалла РВТТТ/РСВМ.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 19-53-52004) с использованием вычислительных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСЦ РАН)*

УДК: 547.333.4; 543.555

Мамаев Павел Владимирович

## ИЗУЧЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНО АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА КОНДУКТОМЕТРИИ

Руководитель: Н.И. Белоцерковец

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

В настоящее время четвертичные аммониевые соединения с различным строением углеводородных радикалов у атома азота находят широкое применение как ионные жидкости.

Цель данной работы - изучение влияния концентрации на удельную электропроводность водных растворов ионной жидкости на примере тетраметиламмоний бромида (ТМАБ). Измерение удельной электропроводности проводили с помощью кондуктометра «Анион 4100» в интервале концентраций от  $10^{-4}$  до  $10^{-1}$  моль/л. Полученные результаты представлены на рисунке в полулогарифмических координатах.

Из полученного графика видно, что исследуемое соединение ведет себя как сильный электролит. В области концентраций  $(2-5) \cdot 10^{-2}$  моль/л электропроводность раствора ТМАБ резко возрастает. Такой скачек электропроводности характерен для водных растворов тетраалкиламмониевых соединений в области критической концентрации мицеллообразования.

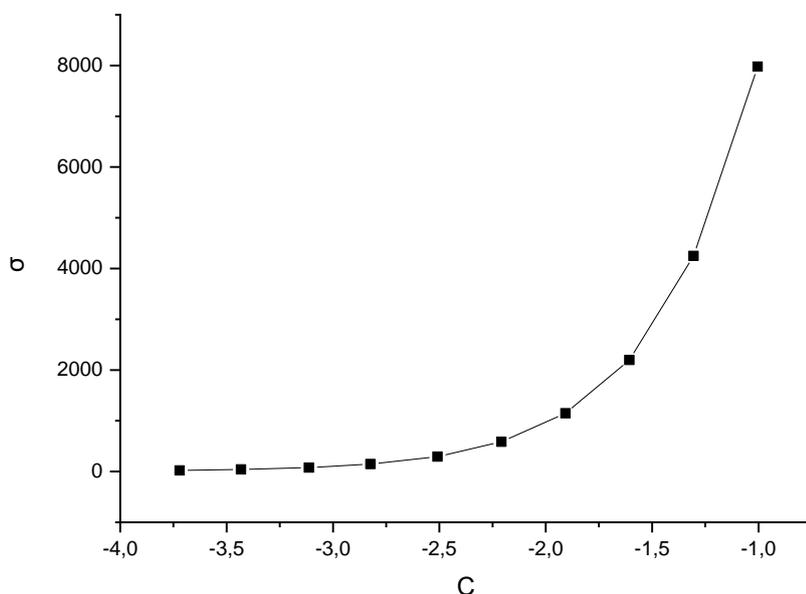


Рисунок. Удельная электропроводность водных растворов ТМАБ в зависимости от концентрации раствора

УДК: 66.097.+665.7

Маркова Мария Евгеньевна

## **ГИДРОТЕРМАЛЬНЫЙ СИНТЕЗ МЕТАЛЛСОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ НА ПОЛИМЕРНОМ НОСИТЕЛЕ**

Руководитель А.А. Степачева

Тверской государственный технический университет

В последние годы все большее внимание привлекают разработка и применение наноразмерных катализаторов. Нанесенные наночастицы металлов обладают уникальными физико-химическими свойствами, связанными со специфической морфологией, дисперсностью и электронной структурой активных центров. Уменьшение размера частиц металла приводит к увеличению удельной поверхности, увеличению каталитической активности, а также к значительному снижению концентрации активной фазы по сравнению с промышленными каталитическими системами.

Для решения поставленных задач можно использовать гидротермальный метод синтеза нанесенных катализаторов. Благодаря уникальным свойствам, субкритические жидкости позволяют контролировать размер получаемых наночастиц, их дисперсность, структуру и морфологию. Низкое поверхностное натяжение сверхкритических жидкостей предотвращает закупорку пор носителя во время синтеза, а низкая вязкость ускоряет диффузию раствора.

Гидротермальное осаждение металлов включает несколько этапов: (1) растворение прекурсора в субкритической жидкости; (2) внесение пористого носителя в полученный раствор; (3) адсорбция раствора в порах и на поверхности носителя; (4) химическое или термическое восстановление прекурсора с образованием частиц активной фазы.

С помощью различных физико-химических методов был исследован состав и структура синтезированных катализаторов. Предложенный метод синтеза позволяет получать каталитические системы, характеризующиеся высокой площадью поверхности, равномерным распределением частиц активной фазы по внутренней и внешней поверхности носителя, а также высокой стабильностью частиц активной фазы к вымыванию и агрегации.

Синтезированные катализаторы были протестированы в жидкофазном синтезе Фишера-Тропша. Монометаллические катализаторы, нанесенные на СПС, позволяют достичь конверсии СО до 10% в течение 3 часов после начала реакции. Такая степень конверсии сравнима со значением, полученным для жидкофазного процесса СФТ в присутствии наиболее часто используемого катализатора  $\text{Co}/\text{Al}_2\text{O}_3$ .

*Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда содействия инновациям (программа У.М.Н.И.К., договор № 15539ГУ/2020 от 04.07.2020).*

УДК: 544.778.3/665.761.6

Маркова Алена Игорьевна

## СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЙ МЕТОД ОЦЕНКИ КАЧЕСТВА ВАЗЕЛИНОВОГО МАСЛА ПРИ ГЕЛЬ-ФОРМОВАНИИ СВМПЭ

Руководители: П.М. Пахомов, С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет, Тверь  
Кафедра физической химии

Перспективным материалом с широким спектром функциональных свойств, применяемым в настоящее время во многих отраслях промышленности для решения различных задач, является сверхвысокомолекулярный полиэтилен (СВМПЭ).

При получении высокопрочных волокон из СВМПЭ методом гель-формования в качестве растворителя реакторного порошка СВМПЭ используется вазелиновое масло (ВМ). При многократном использовании ВМ в технологическом процессе из-за термоокислительной деструкции происходит потемнение и снижение его растворяющей способности. Важно оценить степень загрязнения растворителя продуктами деструкции (ПД). В настоящей работе предлагается спектроскопический метод, основанный на анализе упруго рассеянного света от частиц загрязнителя в ВМ. С помощью этого метода удалось определить степень мутности растворителя, а также средний размер рассеивающих частиц загрязнителя и их распределение по размерам.

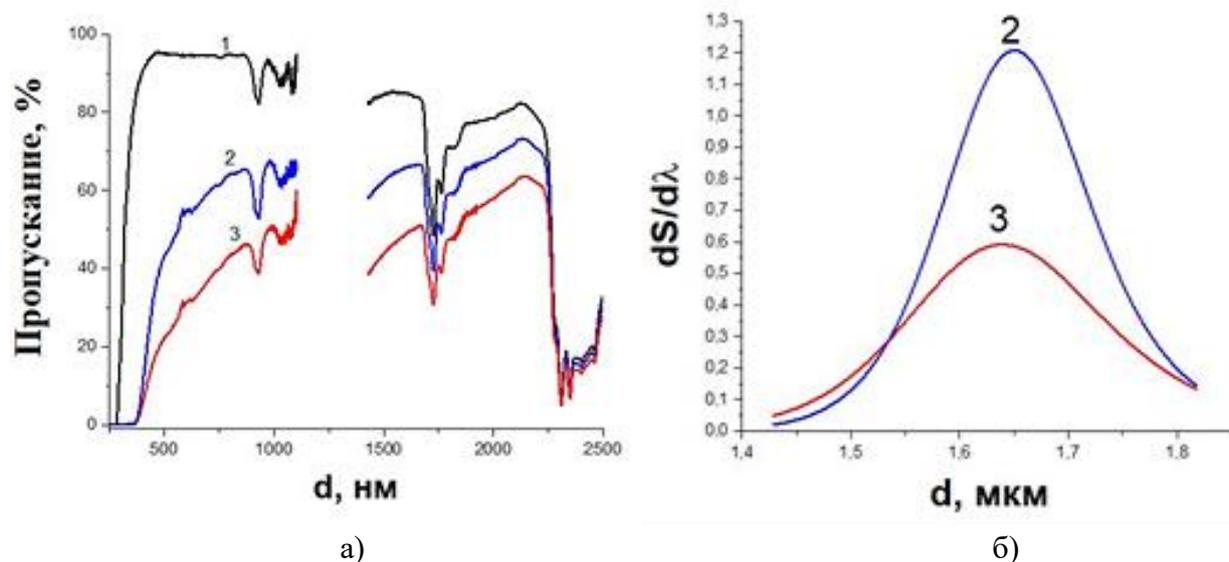


Рис. Совмещенные УФ+ИК (а) спектры ВМ соответственно для образцов: (1) – чистое ВМ, (2) – использовано в работе 3 раза, и (3) – 7 раз. Кривая распределения частиц по размерам, полученная на основе спектроскопических данных (а).

Работа выполнена при финансовой поддержке германо-российской программы G-RISC в рамках научного проекта № L-2021a-1\_d на оборудовании ЦКП ТвГУ.

УДК: 544.163.2

Матус Яна Александровна

## СРАВНЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ГЛУТАМИНА И ГЛУТАМИНОВОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель: Н.П. Русакова, В.В. Туровцев

Тверской государственный университет, г. Тверь

Кафедра физической химии

*L*-глутаминовая кислота (I) и *L*-глутамин (II) - важные аминокислоты в жизни человека: оптически активные *L*-формы АМК участвуют в биосинтезе белков, ферментов, используются в качестве пищевых добавок и т.д. Эти АМК обладают общей структурной формулой  $L\text{-COOH-C}(R)\text{H-NH}_2$ , где  $R = (\text{CH}_2)_2\text{-COOH}$  (I) и  $(\text{CH}_2)_2\text{-C(O)NH}_2$  (II). Строение I и II оптимизировано методом ВЗЛР и получены заряды атомов в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» [1], которые затем были суммированы в заряды групп  $q(R)$  (Таблица). Нумерация групп  $\text{CH}_2$  (Таблица) сделана от хирального атома углерода  $\text{CH}$ ,  $1\text{COOH}$  и  $1\text{NH}_2$  входят в состав хирального фрагмента  $\text{COOH-C}(R)\text{H-NH}_2$ ,  $2\text{COOH}$  и  $2\text{NH}_2$  являются концевыми элементами заместителя  $R$  в  $\text{COOH-C}(R)\text{H-NH}_2$ .

Таблица

Заряды групп  $q(R)^*$  молекул *L*-глутаминовой кислоты (I) и *L*-глутамин (II), в а.е.

$q(R)$ , а.е.								
	$1\text{NH}_2$	$\text{CH}$	$1\text{COOH}$	$1\text{CH}_2$	$2\text{CH}_2$	$2\text{COOH}$	$\text{CO}$	$2\text{NH}_2$
I	-0,296	0,418	-0,185	0,111	0,103	-0,151		
II	-0,298	0,414	-0,188	0,112	0,040		0,275	-0,354

\* $1\text{COOH}$  и  $1\text{NH}_2$  - входят в пептидный фрагмент,  $2\text{COOH}$  и  $2\text{NH}_2$  - нет

Функциональные группы  $\text{NH}_2$  и  $\text{COOH}$  имеют отрицательный заряд, они стягивают часть электронной плотности соседних групп в свой атомный бассейн - индуктивный эффект. Наиболее электроотрицательная аминогруппа в II связана с карбонилем, это отражается в более низкой величине  $q(2\text{NH}_2) = -0,354$  а.е. (Таблица) Карбоксильная группа в II также обладает наименьшим зарядом  $q(\text{COOH})$  по сравнению с I, вследствие меньшего индуктивного воздействия фрагмента  $\text{C(O)NH}_2$  на ближайшие метиленовые группы в II ( $q(\text{C(O)NH}_2) = -0,079$  а.е.) по сравнению с находящейся в идентичном положении  $2\text{COOH}$  в I.

Сопоставление зарядов групп  $\text{COOH}$ ,  $\text{NH}_2$  и  $\text{CO}$  аминокислот I и II (Таблица) позволило составить общее соотношение:

$$q(\text{CO}) > q(\text{COOH}) > q(\text{NH}_2),$$

на основании которого общая для исследуемых молекул качественная шкала групповых электроотрицательностей  $\chi(R)$  имеет вид:

$$\chi(\text{CO}) < \chi(\text{COOH}) < \chi(\text{NH}_2).$$

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. М.: Мир. 2001. 528 с.

УДК: 547.556.9

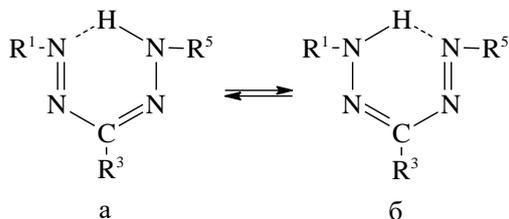
Мелиева Шохсанам Бахтиёровна

## ПОЛУЧЕНИЕ ТРИАРИЛФОРМАЗАНОВ НА ОСНОВЕ СУЛЬФО- И АМИНОБЕНЗОЙНЫХ КИСЛОТ

Руководитель: И.Ю. Егорова

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра органической химии

Формазаны широко применяются в органическом синтезе и аналитической химии, для крашения материалов, мониторинга окружающей среды и т.д. Это обусловлено наличием в них сопряженной системы, состоящей из *азо-* и *гидразонной* групп, и соединяющего их атома углерода. Благодаря чему, молекулы формазанов являются конформационно и таутомерно подвижными, например, для *N,N'*-диарилформазанов характерна *прототропная* таутомерия типа  $R^5NH$  (а)  $\leftrightarrow$   $R^1NH$  (б):



где  $R^1, R^5 = Ar$ ;  $R^3 = H$ .

Представленная работа посвящена получению триарилформазанов на основе сульфо- и аминобензойных кислот.

Синтез триарилформазанов на основе сульфо- и аминобензойных кислот проведен в три стадии. Стадия 1 – получен

фенилгидразон бензальдегида взаимодействием солянокислого фенилгидразина с бензальдегидом в кислой среде ( $pH=1$ ). Стадия 2 – синтезированы соли диазония методом обратного диазотирования. Хлориды *n*-карбоксифенил- и *n*-сульфофенилдиазония получены постепенным введением щелочного раствора солей *n*-аминобензойной и сульфаниловой кислот и водного раствора нитрита натрия в охлажденный до  $0-5^\circ C$  раствор соляной кислоты. Стадия 3 – получены 1-(4-карбоксифенил)-3,5-дифенил- и 1-(4-сульфофенил)-3,5-дифенилформазаны реакцией азосочетания щелочно-спиртового раствора фенилгидразона бензальдегида с синтезированными ранее солями диазония при  $0-3^\circ C$  при интенсивном перемешивании смесей в течении 2 часов и постепенным прибавлением к ним карбоната натрия для поддержания  $pH$  среды до 9-10.

Соединение 1-(4-карбоксифенил)-3,5-дифенилформазан – мелкокристаллическое вещество светло-оранжевого цвета,  $T_{пл.} = 151-152^\circ C$ . Соединение 1-(4-сульфофенил)-3,5-дифенилформазан – кристаллы светло-розового цвета,  $T_{пл.} = 157-159^\circ C$ . Структура синтезированных соединений подтверждена методом ИК-спектроскопического анализа, исследована хелатирующая способность формазанов.

УДК: 66

Мельникова Елизавета Викторовна

## **ПИЩЕВЫЕ КРАСИТЕЛИ: НАТУРАЛЬНЫЕ ИЛИ СИНТЕТИЧЕСКИЕ?**

Руководители: Л.В. Михеева, Н.В. Дубинина

Муниципальное бюджетное общеобразовательное учреждение  
«Средняя школа №19», Тверь

Любой синтетический краситель можно считать потенциально опасным. Его влияние на организм человека до конца не изучено. Безопасны для здоровья только натуральные красители при отсутствии индивидуальной непереносимости компонентов. В них сохраняются полезные вещества, которые придают продуктам дополнительный аромат и вкус. Свекла, морковь, шпинат, специи, яркие ягоды и цитрусовые – вот наш богатый арсенал в домашних условиях.

Проанализировав собранную информацию, было решено попробовать окрасить пасхальные яйца в натуральные красители. Для получения красно-коричнево цвета покрасили яйца с помощью луковой шелухи. Взяли шелуху репчатого лука и шелуху красного крымского лука. Для окрашивания в синий цвет использовали краснокочанную капусту. Ради эксперимента яйца держали в растворе разное время. Цвет получился от голубого до насыщенного синего цвета. Чтобы придать яйцам желтый оттенок, была использована порошковая куркума. В горячую воду добавили пакетик куркумы, вскипятили. Полученный отвар профильтровали, добавили соль и уксус. Поместили туда вареное яйцо. Розовый цвет придает продуктам свекла. В зависимости от концентрации получились разные оттенки красного: от бледно-розового до бордового. Чтобы получить зеленый цвет воспользовались растворами куркумы и краснокочанной капусты. Сначала окрасили яйца в желтый цвет в растворе куркумы, затем опустили яйца в синий раствор. Яйца окрасились в изумрудно-зеленый цвет.

Вывод: природные красители можно получить в домашних условиях, они просты в обращении, ими легко окрашивать продукты питания. Эти красители не загрязняют окружающую среду, в отличие от синтетических красителей, и не вредят здоровью человека.

УДК: 541.49:615.33

Механников Илья Алексеевич

**ПРОЦЕССЫ САМОСБОРКИ В L-ЦИСТЕИН-НИТРАТ СЕРЕБРА  
В СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМАХ,  
ИНИЦИИРОВАННЫЕ ФТОРИД АНИОНОМ**

Руководитель: С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Процессы гелеобразования в супрамолекулярных системах на основе аминокислот вызывают повышенный интерес исследователей, в связи с возможностями применения подобных систем в различных областях – косметологии, медицине, фармакологии. В данной работе изучаются процессы самосборки в низкоконцентрированных супрамолекулярных системах на основе серосодержащей аминокислоты L-цистеин (L-Cys) и нитрата серебра под воздействием фторид анионов. По причине малого радиуса фторид анион обладает высокой плотностью заряда и, как следствие, образует очень прочную водородную связь. Способен ли фторид анион инициировать образование гидрогеля в L-Cys-AgNO<sub>3</sub> системе является целью исследования.

Фторид анион занимает особое место в химии человека, поскольку играет важную роль в различных биохимических процессах. Хорошо известно о его положительной роли в стоматологии – фторсодержащие зубные пасты, но в то же время этот анион в повышенных количествах оказывает отрицательное влияние на обмен веществ в организме и вызывает хроническую интоксикацию.

Образцы для исследования были получены, так называемым, одностадийным методом – путем последовательного смешения компонентов в определенном порядке при интенсивном перемешивании. Молярное соотношение исходных компонентов (Ag<sup>+</sup>/L-Cys) в образцах варьировали в интервале 1,5 – 2,0; содержание фторид аниона изменяли в пределах 0,25 – 1,00 мМ; концентрация L-Cys составляла 3,0 мМ. Процессы самосборки в системах изучали с помощью методов УФ спектроскопии и динамического светорассеяния (ДСР). Установлено, что при одинаковых условиях (концентрации, молярном соотношении исходных компонентов) фторид анион, в отличие от хлорида, не инициирует образование геля, однако после смешения компонентов образуются прозрачные образцы с желтоватым оттенком. Электронные спектры фторидсодержащих образцов свидетельствуют о формировании олигомерных цепей типа [-Ag-S(R)-Ag-S(R)-]<sub>n</sub>, где R – фрагмент цистеина, что не отрицает роль фторид аниона как инициатора гелеобразования при особых условиях.

*Данная работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии  
центра коллективного пользования ТвГУ.*

УДК: 635.21

Мигулев Сергей Павлович

## **ВЛИЯНИЕ НЕКОРНЕВЫХ ПОДКОРМОК РЕГУЛЯТОРАМИ РОСТА И УДОБРЕНИЯМИ НА ПРОДУКТИВНОСТЬ СОРТОВ КАРТОФЕЛЯ В УСЛОВИЯХ ВЕРХНЕВОЛЖЬЯ**

Руководитель: З.И. Усанова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия

Кафедра технологии переработки и хранения сельскохозяйственной продукции

Картофель (*Solanum tuberosum* L.) - важнейшая пищевая, техническая и кормовая культура с ценным химическим составом клубней. Укреплению продовольственной безопасности России будет способствовать совершенствования технологий возделывания данной культуры за счет внедрения новых приемов, в частности некорневой подкормки регуляторами роста растений, а также микро- и макроэлементными удобрениями.

В связи с этим, нами были проведены исследования в двухфакторном полевом опыте на опытном поле Тверской ГСХА в 2020 г. на дерново - среднеподзолистой остаточной карбонатной глееватой почве на морене, легкосуглинистой по гранулометрическому составу, хорошо окультуренной. Изучались факторы: А – Сорт: 1 – Колумба, 2 – Айвари Рассет, 3 – Ред Скарлетт, 4 – Гала. В – Препарат: 1 - Контроль (без обработки), 2 – Аквамикс (220 г/га), 3 – Смесь комплексонатов Zn + Cu – ЭДДЯК (этилендиаминдипропановая кислота) (раствор) (7 л/га).

Выявлено, что прохождение фаз развития растений картофеля в большей степени зависят от сорта и не зависят от применения некорневой подкормки и регулятора роста. Бутонизация отмечена раньше у сортов Колумба и Гала (29 июня), чуть позднее (2 июля) – у сорта Ред Скарлетт, позже остальных сортов (14 июля) – у сорта Королева Анна. Цветение наблюдалось раньше у сортов Колумба, Ред Скарлетт и Гала (14 июля), позднее (29 июля) – у сорта Королева Анна.

Наибольшей продуктивностью обладал сорт Ред Скарлетт. В среднем по вариантам некорневой подкормки он обеспечил фотосинтетический потенциал агроценоза 3062,0 тыс. м<sup>2</sup>/га, урожайность 43,62 т/га, содержание сухого вещества в клубнях - 19,89 %. Наибольшие урожаи клубней у данного сорта при наилучшем их качестве получены в варианте применения регулятора роста Циркон и смеси комплексонатов Zn-ЭДДЯК + Cu ЭДДЯК.

УДК: 662.756.3+544.478

Михайлов Степан Петрович

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РЕАКЦИИ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОГО АМИНИРОВАНИЯ

Руководитель: М.Г. Сульман, д.х.н., профессор

Тверской государственный технический университет  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Чаще всего, амины могут быть синтезированы путем прямого аминирования алкилгалогенидов или прямым аминированием спиртов.

Образец Ni-25 мас. % – HPS показал самую высокую активность, поэтому все дальнейшие эксперименты проводились с использованием этого образца.

В ходе опытов N-метил-D-глюкозимин, N-метил-D-глюкозамин были выявлены в реакционной среде и будут рассмотрены как основные продукты. Изучение влияния температуры на выход N-метил-D-глюкозамина и N-метил-D-глюкозимина представлено на рисунке 1. Повышение температуры реакции приводит к увеличению выходов N-метил-D-глюкозамина и N-метил-D-глюкозимина [1].

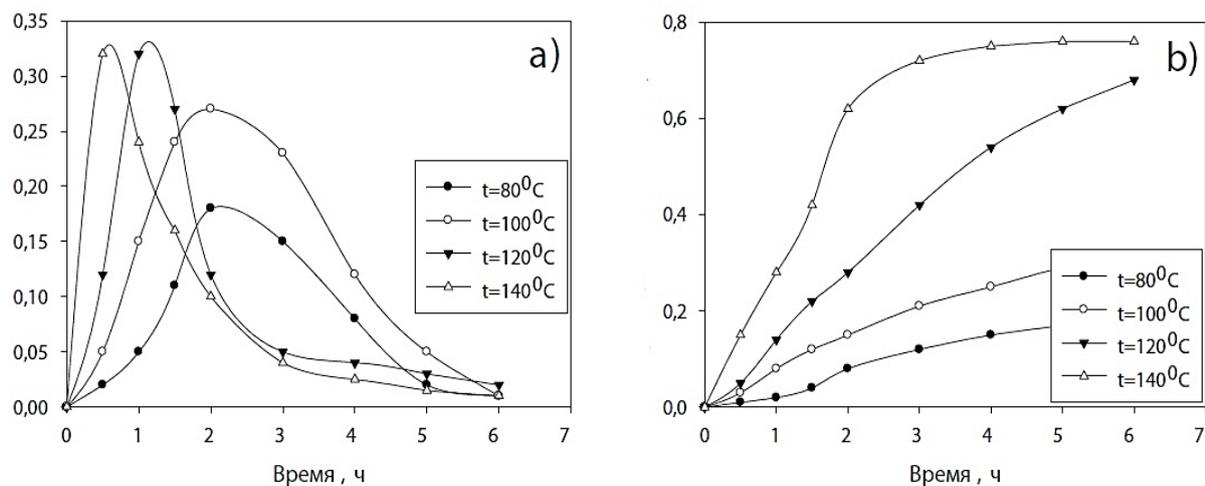


Рисунок 1: Влияние температуры на синтез N-метил-D-глюкозамина.  
а) концентрация метилглюцимина (моль/л); б) концентрация метилглутамина (моль/л)

Было определено, что начальная активность катализатора составляет 1.3 кг (глю)/(кг(кат)\*ч) при 99.3–99.6% конверсии D-глюкозы. Селективность процесса к N-метил-D-глюкозамину составила 97.6–97.8%.

Исследование выполнено в рамках проекта РФФИ 19-38-90050

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сульман М.Г., Михайлов С.П., Сульман А.М., Ресурсосберегающий способ одностадийного синтеза N-метилглюкамина. // Сборник научных трудов II Международной научной конференции. Под общей редакцией Д.В. Розова, Г.Г. Скворцовой. 2020. С. 279-284

УДК: 631.8

Михайлова Елена Михайловна

## **БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПОЛУЧЕНИЯ ПОСАДОЧНОГО МАТЕРИАЛА ХВОЙНЫХ КУЛЬТУР**

Руководитель: Е.А. Прутенская, к.б.н., доцент

Тверской государственной технической университет  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

В настоящее время обсуждаются перспективы использования биотехнологических подходов в лесном хозяйстве. Фундаментальные и прикладные работы направлены на получение посадочного материала хвойных пород деревьев, производство биологических средств защиты лесов, создание криобанков для сохранения генетических ресурсов и т.д.

К основным преимуществам использования биотехнологических приемов можно отнести следующие:

- быстрое размножение ценных клонов;
- возможность работы в течении всего года;
- паспортизация сортов и форм с помощью молекулярно-генетического маркирования и установление филлогенетических связей;
- длительное хранение материала в условиях *in-vitro*.

Технология производства оздоровленного посадочного материала в качестве составной части включает биотехнологические приемы, комплексное оздоровление с использованием химио- и термотерапии, ускоренное размножение оздоровленных экземпляров на искусственных питательных средах.

В лесной зоне России широко используемые на практике упрощенные технологии закладки и выращивания лесных культур, как правило, не дают им преимуществ в росте по сравнению с молодняками естественного происхождения. В отличие от таких посадок культуры ели и сосны, заложенные с использованием интенсивных агротехнических приемов, растут быстрее и превосходят по продуктивности обычные культуры. Форсировано высокая скорость роста таких культур достигается благодаря сочетанию определенных факторов и условий. К числу наиболее значимых факторов, имеющих огромный потенциал улучшения, относится применение стимуляция роста семенного и посадочного материала.

Объектами исследований были семена хвойных растений. В качестве регуляторов роста в питательную среду добавляли меланины в различных концентрациях.

УДК: 635.65

Михайлова Полина Дмитриевна

## **СТВОРКИ БОБОВЫХ КУЛЬТУР – ПЕРСПЕКТИВНОЕ ВТОРИЧНОЕ СЫРЬЕ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ АНТИОКСИДАНТОВ**

Руководитель: Е.В. Ожимкова

Тверской государственной технической университет, г. Тверь  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

В последнее время особое внимание исследователей сосредоточено на получении биологически активных веществ (в том числе антиоксидантов) из отходов сельскохозяйственных производств. Наибольший интерес, с точки зрения ценных питательных веществ, представляют вторичные ресурсы, образующиеся при переработке фруктов и овощей. Из консервированной овощной продукции на долю бобовых культур (горох, бобы) приходится примерно 40%. При промышленной заготовке бобовых культур образуются отходы в виде ботвы и створок, при этом выход семян составляет 15-20% от всей скошенной массы. На сегодняшний день отходы переработки бобовых культур в свежем, сушеном или силосованном виде чаще всего используют в качестве кормов для сельскохозяйственных животных [1].

В работе исследовано получение антиоксидантов из створок бобовых культур. Экстракты получали путём настаивания измельченного растительного сырья (створок бобов и гороха) с дистиллированной водой при  $23 \pm 1$  °С и отсутствии прямых солнечных лучей, варьируя гидромодуль (1:10, 1:15, 1:20, 1:30) и продолжительность процесса (от 1 часа до 2 суток). Антиоксидантную активность полученных водных экстрактов определяли перманганатным методом [2]. Экспериментально подобраны оптимальные условия проведения процесса, обеспечивающие получение экстрактов с максимальной антиоксидантной активностью и стабильностью при хранении без использования дополнительных консервантов и стабилизаторов. Полученные результаты подтверждают перспективность использования створок бобовых культур в качестве источника антиоксидантов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Moure A. Natural antioxidants from residual sources // Food chemistry. 2001. P. 72. Vol. 2. P. 145-171.
2. Нилова Л.П. Определение антиоксидантной активности порошков из растительного сырья перманганатным методом // Торгово-экономические проблемы регионального бизнес пространства. 2015. С. 118-122.

УДК: 544.478-03

Михеев Алексей Витальевич

## **ЖИДКОФАЗНОЕ ГИДРИРОВАНИЕ ФЕНОЛА НА ПОЛИМЕРНОМ ПАЛЛАДИЕВОМ КАТАЛИЗАТОРЕ**

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

Тверской государственный технический университет, г. Тверь  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Фенол – кислородсодержащее ароматическое органическое вещество, имеющее формулу  $C_6H_6O$ . Данное вещество можно получать на производстве как в качестве целевого, так и в качестве побочного продукта. Сам фенол может быть использован для производства средств защиты растений, присадок к маслам, красителей и т.д. Продукт гидрирования фенола (циклогексанон) является основой получения предельных спиртов, карбонильных соединений и эфиров. Кроме того, продукты гидрирования фенола можно использовать в синтезе углеводов, а также в производстве синтетических смол. Учитывая большой объем производства фенола и продуктов его гидрирования, а также рост спроса на эти продукты, разработка различных способов гидрирования фенола является актуальной.

В химической технологии кислородсодержащих соединений очень важным аспектом является изучение их каталитического гидрирования. Сложность осуществления данной реакции состоит в том, что несколько связей конкурируют между собой при проведении гидрирования. К этим связям относятся ароматические двойные связи в бензольном кольце фенола, кроме того при гидрировании образуется промежуточное соединение по одному из пути гидрирования – циклогексахинон, в котором присутствует кетонная связь. В таком случае провести процесс гидрирования фенола с высоким выходом довольно проблематично.

В данной работе был изучен процесс жидкофазного гидрирования фенола в присутствии палладиевого катализатора 2%Pd/MN100 на основе свёрнутого полистирола. Реакцию проводили в периодическом режиме в реакторе автоклавного типа при температуре 150°C и давлении водорода 2 МПа. Было показано, что использование данного катализатора позволяет проводить реакцию гидрирования фенола в водной среде с достижением конверсии свыше 98%.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда  
(проект №20-19-00386).*

УДК: 543.06:546.723

Мовсесян Назели Суреновна

## **СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СОВРЕМЕННЫХ МЕТОДОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИОНОВ ТРЕХВАЛЕНТНОГО ЖЕЛЕЗА В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ**

Руководитель: А.Е. Соболев

Тверской государственный технический университет, г. Тверь  
Кафедра химии и технологии полимерных материалов

Разработка процессов извлечения металлов из руд и концентратов невозможна без исследования поведения соединений железа, которые очень широко представлены в этих образцах в виде разнообразных сульфидов и оксидов. Наряду с гидролитическими технологиями переработки подобного сырья (в ходе которых образующиеся неустойчивые ионы двухвалентного железа подвергаются окислению лишь кислородом воздуха) в промышленности широко используются также гидрохимические методы окислительного растворения руд и концентратов, напрямую приводящие к образованию ионов  $Fe^{3+}$  [1]. В связи с этим поиск, отработка и совершенствование методов определения ионов трехвалентного железа в водных растворах представляет собой актуальную аналитическую задачу.

Проведен сравнительный анализ современных химических и физико-химических методов определения ионов трехвалентного железа в водных средах. Проанализированы метрологические характеристики указанных методов [2]; оценены их экологичность и трудоемкость реализации. Обсуждена возможность использования данных методов при изучении процессов гидролитического и окислительного растворения оксидных и сульфидных руд и концентратов. Для каждого метода рассмотрен вопрос о влиянии используемых гидрometаллургических реагентов на процедуру анализа и сделан вывод о необходимости их удаления. Показано, что при изучении кинетики процессов растворения руд и концентратов определение ионов  $Fe^{3+}$  наиболее целесообразно проводить фотокolorиметрическими методами, например, с сульфосалициловой кислотой.

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Луцик В.И., Соболев А.Е. Кинетика гидролитического и окислительного растворения сульфидов металлов: Монография. – Тверь: ТвГТУ, 2009. – 139 с.
2. Луцик В.И., Соболев А.Е., Чурсанов Ю.В. Физико-химические методы анализа: учебн. пособие. – Тверь: ТвГТУ, 2021. – 3-е изд., перераб. и дополн. – 212 с.

УДК: 661.728.7

Момзякова Ксения Сергеевна

**ОЦЕНКА ЗАВИСИМОСТИ СВОЙСТВ ТРАВЯНИСТОЙ  
ЦЕЛЛЮЛОЗЫ ОТ УСЛОВИЙ ЕЁ ОТБЕЛКИ**

Руководитель: Р.Я. Дебердеев

Казанский национальный исследовательский технологический университет  
Кафедра технологии переработки полимеров и композиционных материалов

В настоящей работе исследовано влияние условий отбеливания целлюлозы из соломы овса и люцерны на их физико-химические и цветовые характеристики. Обработку целлюлозы осуществляли двумя способами, один из которых представляет собой горячее облагораживание целлюлозной массы с последующей отмывкой и перекисной отбелкой в щелочной среде (1), а второй, заключается в обработке целлюлозной массы смесью перекиси водорода и молибдата аммония в кислой среде с последующей отмывкой и дополнительной перекисной отбелкой в щелочной среде (2).

Таблица

Физико-химические характеристики целлюлозы люцерны и овса  
в зависимости от условий отбеливания

Природа материала	Способ отбеливания	$\alpha$ -целлюлоза, %	Лигнин, %	Смолы и жиры, %	Зола, %	Степень полимеризации	Выход, %	Яркость	Кристалличность
Люцерна	Без отбеливания	84,7	14,5	0,2	5,0	1260	45,0	81	0,77
	1	86,2	11,0	0,1	5,0	800	39,5	92,8	-
	2	87,9	0,0	0,0	0,8	350	28,4	95,4	0,81
Овёс	Без отбеливания	76,8	7,0	1,8	5,5	1020	42,0	65,0	0,65
	1	78,0	3,5	0,2	6,3	1080	31,5	88,6	-
	2	76,5	<0,01	0,3	1,0	500	27,7	92,4	0,77

Установлено, что перекисно-молибдатная отбеливание целлюлозной массы из соломы овса и люцерны приводит к получению волокон целлюлозы с высокой степенью яркости – 92,4 и 95,4 соответственно. При этом целлюлоза люцерны имеет относительно высокий индекс кристалличности – 0,81 и содержание  $\alpha$ -целлюлозы – 87,9.

*Работа выполнена в рамках гранта РФФИ, проект № 18-29-18077.*

УДК: 662.756.3+544.478

Монжаренко Маргарита Александровна

## **КИНЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛУЧЕНИЯ ЖИРНЫХ СПИРТОВ МЕТОДОМ ГИДРИРОВАНИЯ ЖИРНЫХ КИСЛОТ**

Руководитель: А.А. Степачёва, к.х.н., доцент

Тверской государственный технический университет  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Жирные спирты являются полупродуктами многих веществ. Амфифильный характер жирных спиртов, который достигается наличием неполярной липофильной углеводородной цепи и полярной гидрофильной гидроксильной группы, обеспечивает поверхностную активность этих соединений. По этой причине, жирные спирты широко используются в качестве лубрикантов, при синтезе ПАВ, в косметической, фармацевтической, кожаной, и металлургической промышленности.

В промышленности жирные спирты получают, в основном, окислением углеводородов нефти. Другим способом производства жирных спиртов является гидрирование карбонильной группы таких молекул, как альдегиды, эфиры или жирные кислоты, составляющих растительные масла и жиры. Контроль над хемоселективностью, как показывают экспериментальные данные, зависит от таких факторов состава и строения катализаторов, как композиция, метод синтеза, тип носителя, размер частиц, условия активации. Поэтому выбор наиболее эффективного катализатора является важной задачей для получения высших алифатических спиртов из возобновляемого сырья.

В данной работе проводилось кинетическое исследование селективного восстановления карбоксильной группы стеариновой кислоты, выбранной в качестве модельного соединения. Процесс гидрирования осуществлялся в реакторной системе серии Parr 5000 Multiple (ParrInstrument, США), оснащенной магнитной мешалкой. В качестве растворителя использовался н-гексан. В качестве катализатора по результатам предыдущих исследований был выбран 1%Pd/MN-270. Реакция проводилась при следующих условиях: температура – 80-120 °С, парциальное давление водорода – 1.0-4.0 МПа, концентрация стеариновой кислоты в гексане – 0.2 моль/л, масса катализатора – 0.05 г. Анализ жидкой фазы проводили с помощью газового хроматографа GC-2010 и масс-спектрометра GCMS-QP2010S (SHIMADZU, Япония).

УДК: 541.64:546.57

Мосолова Дарья Игоревна

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ  
НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНОЙ ДНК  
С L-ЦИСТЕИН/AgNO<sub>3</sub> СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОЙ СИСТЕМОЙ**

Руководитель: Д.В. Вишневецкий, Я.В. Андрианова

Тверской государственный университет, Тверь, Россия  
Кафедра физической химии

Недавно в экспериментах *in vitro* было показано, что система на основе водных растворов L-цистеина и нитрита серебра обладает способностью подавлять раковые клетки карциномы молочной железы человека при отсутствии цитотоксического действия по отношению к клеткам легочной ткани человека эмбриональным фибробластам [1]. Известно, что одним из механизмов гибели клетки является угнетение активности ДНК. Таким образом, в настоящей работе на модельной системе была изучена самоорганизация при смешении L-цистеин/AgNO<sub>3</sub> водного раствора и водного раствора ДНК (D3159, ММ=10-30 кДа) при разных соотношениях исходных компонентов.

Методом УФ-спектроскопии установлено, что при введении в раствор ДНК L-цистеин/AgNO<sub>3</sub> системы и увеличения содержания последней, происходит постепенное увеличение оптической плотности максимума при 260 нм, отвечающей поглощению азотистых оснований в ДНК. Методом динамического рассеяния света показано, что размеры молекул ДНК уменьшаются при введении L-цистеин/AgNO<sub>3</sub> системы. Определена область растворимых и нерастворимых комплексов при смешении данных растворов. Определены заряды агрегатов, формирующихся в системе. Измерены значения рН среды. Конечные системы исследованы методом сканирующей электронной микроскопии и элементного анализа.

*Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.*

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. D.V. Vishnevetskii, A.R. Mekhtiev, T.V. Perevozova, D.V. Averkin, A.I. Ivanova, S.D. Khizhnyak and P.M. Pakhomov. L-cysteine/AgNO<sub>2</sub> low molecular weight gelators: self-assembly and suppression of MCF-7 breast cancer cells. // *Soft Matter*. 2020 doi.org/10.1039/D0SM01431A.

УДК: 663.126+661.856.532

Муравьева Анна Юрьевна

## ПОЛУЧЕНИЕ БИОСОРБЕНТОВ НА ОСНОВЕ ИММОБИЛИЗОВАННЫХ ДРОЖЖЕЙ

Руководитель: А.А. Степачёва, к.х.н., доцент

Тверской государственный технический университет, г. Тверь  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Биосорбционные технологии с использованием микроорганизмов находят все большее применение в различных отраслях промышленности и природоохранных мероприятиях. В то же время их использование сдерживают проблемы технического характера, а именно: эксплуатация и регенерация нативного биосорбента. В связи с этим возникает интерес в получении более технологичных в эксплуатации твердых биосорбентов, путем иммобилизации клеток микроорганизмов на твердом носителе. Поэтому биосорбционные системы на основе иммобилизованных дрожжей представляют собой большой интерес для извлечения ионов тяжелых металлов из водных растворов.

В данной работе было рассмотрено влияние носителей на эффективность извлечения ионов меди иммобилизованными дрожжами. Были использованы шесть типов носителей: H-ZSM-5, H-Mord, H-Y, SiO<sub>2</sub>, сверхсшитый полистирол MN-100 измельченный и неизмельченный. На них методом адсорбции наносился раствор из предварительно смешанных дрожжей 0,1 г и синтетической питательной среды Ридра 1 мл. Нанесенные дрожжи оставались сохнуть на часовых стеклах в течение недели. По построенной градуировочной зависимости оптической плотности от концентрации растворов медного купороса проведено определение концентрации ионов меди в растворе после сорбции с помощью нескольких опытов. Для этого 0,1 г иммобилизованных дрожжей смешивали с 10 мл 0,2 М раствора медного купороса. В первом случае – перемешивание проводилось в течение 30 мин при комнатной температуре, а во втором - проводилось термостатирование смеси при комнатной температуре в течение 30 минут. Затем смесь отфильтровывали и фотоэлектродетектировали при длине волны 640 нм.

Сравнение полученных результатов показало, что дрожжи, иммобилизованные на H-ZSM-5 и H-Mord, позволяют извлекать до 30 и 35 % ионов меди соответственно. Полимерный носитель показал худший результат, вероятно, за счет своей гидрофобности. Было отмечено, что перемешивание практически не влияет на эффективность биосорбции.

УДК: 543: 615.33

Мурсалов Руслан Кямранович

**ПЛАНАРНЫЕ СЕНСОРЫ  
ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АМОКСИЦИЛЛИНА  
В ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТАХ**

Руководитель: Е.Г. Кулапина, д.х.н., проф.

Саратовский национальный исследовательский государственный университет  
имени Н.Г. Чернышевского, г. Саратов  
Кафедра аналитической химии и химической экологии

Амоксициллин – амфотерный антибиотик с карбоксильной и амино-группами, существует в виде катиона, цвиттер-иона и аниона [1].

В настоящей работе созданы планарные амоксициллин-селективные сенсоры, представляющие собой подложку с чернилами, содержащими порошок углерода, электродноактивное вещество - ассоциат диметилдистеариламмония с комплексными соединениями серебро (I) – амоксициллин (Сэав = 2 %), ПВХ, пластификатор дибутилфталат, смесь циклогексанона с ацетоном (1:1).

Оценены электроаналитические и операционные характеристики планарных сенсоров в растворах амоксициллина: интервал линейной зависимости  $E = f(-\lg C)$   $1 \cdot 10^{-2}$ - $1 \cdot 10^{-4}$  М,  $C_{\min} = 8 \cdot 10^{-5}$  М, угловой коэффициент электродных функций  $50 \pm 2$  мВ/рС, время отклика в  $1 \cdot 10^{-3}$  М растворе 20-30 с, дрейф потенциала 5-7 мВ/сут., срок службы 1 мес.

Электродные функции потенциометрических сенсоров в растворах просроченных препаратов амоксициллина, амоксиклава имеют заниженные угловые коэффициенты; при введении однократной добавки стандартного  $1 \cdot 10^{-3}$  М раствора амоксициллина происходит увеличение углового коэффициента электродных функций. Определение амоксициллина в фармпрепаратах проводили способом однократной и многократной добавок стандартного раствора амоксициллина [2].

Показано, что происходит уменьшение содержания основного вещества в препаратах при продолжительном хранении.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Алексеев В.Г. Металлокомплексы пенициллинов и цефалоспоринов (обзор) // Хим.-фарм. журн. 2011. Т. 45. № 11. С. 31-48.
2. Белюстин А.А. Потенциометрия: физико-химические основы и применения / СПб.: Лань. 2015. 336 с.

УДК: 541.64:541.59

Навров Андрей Владимирович

## **ВЛИЯНИЕ СЕЛЕНОСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ПРОДУКТИВНОСТЬ РАЗНЫХ СОРТОВ КАРТОФЕЛЯ**

Руководитель: О.В. Шилова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь  
Кафедра агрохимии и земледелия

Для обеспечения растений микроэлементами, а также в целях сохранения экологического равновесия в сельскохозяйственной практике следует отдавать предпочтение органическим соединениям, которые содержат важные элементы для живых организмов (например, селен). В связи с недостатком селена в Тверской области, существует необходимость увеличения его соединений как в почве, так и в получаемой растениеводческой продукции. Целью исследований являлось изучение действия экологически безопасного селеносодержащего комплексоната на основе этилендиаминдиантарной кислоты (Se-ЭДДЯК) в качестве некорневой подкормки в сравнении с селенитом натрия ( $\text{Na}_2\text{SeO}_3$ ) на разных фонах питания на почву и опытную культуру. Селеносодержащий комплекс был синтезирован на кафедре агрохимии и земледелия Тверской ГСХА доцентом Смирновой Т.И. На опыте возделывался картофель сортов Коломбо и Королева Анна.

Анализ используемого в опыте агрогумата калия показал, что удобрение обладало слабощелочной реакцией ( $\text{pH}_{\text{KCl}} = 8,6$ ) и включало высокое количество органического вещества (60,4%). Среди основных питательных элементов преобладал калий (7,53%); содержание азота оказалось средним (3,56 %), а фосфора – низким (0,97 %). Применение агрогумата позволило обеспечить растения достаточным количеством нитратного азота, подвижного фосфора и обменного калия на протяжении всего вегетационного периода картофеля обоих сортов (по сравнению с контролем показатели были выше в среднем на 5,6 – 22,9%).

Обработка растений растворами биологически активных соединений, как в сочетании с разными дозами агрогумата, так и без их применения, способствовала увеличению урожайности картофеля обоих сортов. Совместное применение разных доз агрогумата и комплексоната селена позволило увеличить выход клубней картофеля исследованных сортов в среднем на 16,0 – 17,5%, а без применения удобрения – в среднем на 3,9 – 7,7%. Следует отметить, что в клубнях обоих сортов возросло количество крахмала (в среднем на 0,2 – 14,9%). Комплексонат селена на удобренном фоне по сравнению с селенитом натрия и комплексоном на органоминеральном фоне способствовал увеличению крахмала в клубнях картофеля исследуемых сортов (на 7,5–9,0% – у сорта Коломбо и на 8,5 – 10,0% – у сорта Королева Анна соответственно).

УДК: 536.4:544.77

Небывалова Кристина Константиновна

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ/НЕСТАБИЛЬНОСТИ НАНОСТРУКТУР ЯДРО-ОБОЛОЧКА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА БРЭГГА-ВИЛЬЯМСА

Научный руководитель: В.М. Самсонов

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра общей физики

Метод Брэгга-Вильямса объединяет довольно широкий круг подходов к фазовым переходам порядок/беспорядок, связанных с введением и расчётом параметра порядка  $J$ . В основном метод разработан и широко известен на примере эквиатомного сплава типа Cu-Zn с объёма центрированной решеткой. В данной работе мы впервые применили метод Брэгга-Вильямса к прогнозированию стабильности/нестабильности одной из двух альтернативных наноструктур ядро-оболочка A@B и B@A, где первый символ отвечает ядру частицы, а второй (после @) – её оболочке. В нашем случае  $J = 1$  будет отвечать идеально упорядоченной структуре, а  $J = 0$  – полностью хаотичному наносплаву A-B, т.е. разрушению оболочечной структуры. Равновесное значение параметра порядка находится из необходимого условия минимума энергии Гельмгольца  $F$ , т.е. из условия  $\partial F / \partial J = 0$ . В результате установлено, что критическая температура  $T_c$  перехода «порядок/беспорядок» зависит от выбора типа наноструктуры и отличается от значений  $T_c^{(\infty)}$ , отвечающему объемному сплаву. В соответствии с развитой теорией  $T_c^{(\infty)} = \Delta H_{ex} / R$ , где  $\Delta H_{ex}$  – избыточная энтальпия смещения,  $R$  – универсальная газовая постоянная. Для эквиатомного сплава Cu-Ni, было найдено значение 562K, согласующееся с максимальным значением критической температуры 628K, отвечающей мольной фракции Ni, равной 0,673 [1]. Величина  $\Delta H_{ex}$  находилась из уравнения типа уравнения Редлиха-Кистера, предложенного Дж. Каптаем [2]. Результаты расчетов  $T_c^{(\infty)}$  представлены в таблице.

Таблица

r, нм	$T_c$ , К	
	Ni@Cu	Cu@Ni
2,0	262	0
3,0	362	0
4,0	412	0
5,0	442	0

Эти результаты предсказывают стабильность наноструктур Ni@Cu и нестабильности наноструктур Cu@Ni.

Работа подготовлена в рамках госзадания 0817-2020-007

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Massalski T.B. Ed. ASM International, Materials Park. // 1990
2. Каптай G. // Calphad 2004. V.28. P.115-124.

УДК: 544.132:544.169

Нефедова Ирина Андреевна

## ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ДЕКАНСУЛЬФОНА

Руководители: Н.П. Русакова, В.В. Туровцев

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии, Кафедра общей физики

Объектами квантовохимического исследования стали девять молекул *n*-декансульфона  $\text{CH}_3\text{-(CH)}_k\text{-R-(CH)}_l\text{-CH}_3$ , где  $R = \text{S(O)}_2$ ,  $0 \leq k, l \leq 8$ . Геометрия соединений оптимизирована методом B3LYP в программе Gaussian 03. Объемы атомов получены в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» с помощью AIMALL, суммированы в параметры групп -  $V(R)$  и сведены в Таблицу. Результаты вычислений показывают зеркальную симметричность в  $V(R)$  при  $k, l$  равных 0, 8; 1, 7; 2, 6 и 3, 5, поэтому представлена только половина соединений. Ранее подобная методика применялась для определения электронных характеристик рядов серосодержащих соединений в работах [1, 2].

Таблица

Объемы групп  $V(R)^*$  в изомерах положения *n*-декансульфона  
 $\text{CH}_3\text{-(CH}_2)_k\text{-R-(CH}_2)_l\text{-CH}_3$ , где  $R = \text{S(O)}_2$ ,  $0 \leq k, l \leq 8$ , в  $\text{Å}^3$

<i>k, l</i>	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub>								
		R	R	R	R	R					
0, 8	31,8	48,1	23,0	22,4	23,5	23,4	23,4	23,5	23,5	23,6	33,0
1, 7	31,8	23,2	47,8	23,0	22,4	23,4	23,4	23,5	23,5	23,6	33,0
2, 6	32,8	22,6	23,1	47,8	23,0	22,4	23,4	23,4	23,5	23,6	33,0
3, 5	32,8	23,5	22,5	23,0	47,8	23,0	22,4	23,4	23,4	23,6	33,0
4, 4	32,9	23,6	23,4	23,5	23,0	47,8	23,0	23,5	23,4	23,6	32,9

\*В затемненных ячейках показан объем группы  $\text{S(O)}_2$

Стандартные значения групповых объемов  $\text{SO}_2$ ,  $\text{CH}_2$  и  $\text{CH}_3$  для рассматриваемого ряда  $\text{CH}_3\text{-(CH}_2)_k\text{-R-(CH}_2)_l\text{-CH}_3$ , где  $R = \text{S(O)}_2$ ,  $0 \leq k, l \leq 8$ , составляют:  $V(\text{SO}_2)_{cm} = 47,8 \text{ Å}^3$ ;  $V(\text{CH}_2)_{cm} = 23,5 \text{ Å}^3$ ;  $V(\text{CH}_3)_{cm} = 33,0 \text{ Å}^3$ . Величина  $V(\text{CH}_2)$  соседних с  $\text{SO}_2$  понижена (Таблица) относительно  $V(\text{CH}_2)_{cm}$ . Отток электронной плотности с этих метиленов в бассейн  $\text{SO}_2$  сопровождается уменьшением  $V(\text{CH}_2)$ . Таким образом, индуктивный эффект сульфогруппы распространяется на  $V(\text{CH}_2)$  в обе стороны вдоль алкильных цепей изомеров *n*-декансульфона. Соседство  $\text{SO}_2$  с  $\text{CH}_3$  в молекулах, где  $k, l$  равны 0, 8 и 8, 0, сопровождается увеличением  $V(\text{SO}_2)$  по отношению к  $V(\text{SO}_2)_{cm}$ .

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Сравнительный анализ электронного строения и электроотрицательности групп неизвестных простых эфиров сульфоксидной кислоты // *Журнал структурной химии*. 2015. Т. 56. №12. С 29-33.
2. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Котомкин А.В. Электронное строение радикалов эфиров сульфоксидной кислоты. // *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2019. Т. 62. Вып. 10. С. 96-102.

УДК: 662.753.3+544.478

Нехаева Зинаида Олеговна

## РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ УТИЛИЗАЦИИ СТОЧНЫХ ВОД ЖИВОТНОВОДЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОВ МЕТОДОМ БИОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ ОЧИСТКИ

Руководитель: В.П. Молчанов, д.т.н., профессор

Тверской государственный технический университет  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

В настоящее время, большой проблемой для животноводческих комплексов стала очистка сточных вод. Жидкий навоз представляет собой полидисперсную систему, в состав которой входит: вода, твердая фракция, газообразные соединения. Кроме этого стоки содержат отходы кормов, техническую воду от мытья животных с наличием жира и шерсти, хозяйственно-бытовые стоки. Особая опасность заключается в наличии патогенных микроорганизмов, яиц гельминтов, высокого содержания тяжелых металлов и пестицидов.

Таблица 1

Нормативные и фактические значения ПДК химических веществ в пробе сточной воды

	ПДК [1] не более	Фактическое значение
БПК <sub>5</sub>	4 О <sub>2</sub> /дм <sup>3</sup>	16 О <sub>2</sub> /дм <sup>3</sup>
ХПК	30 О <sub>2</sub> /дм <sup>3</sup>	57 О <sub>2</sub> /дм <sup>3</sup>
Кадмий	0,001 мг/л	0,021 мг/л
Свинец	0,01 мг/л	0,09 мг/л
Мышьяк	0,01 мг/л	0,14 мг/л
Ртуть	0,0005 мг/л	0,0012 мг/л
Бензапирен	0,000001 мг/л	0,000091 мг/л

Биокаталитическую очистку производственных сточных вод предполагается организовать в новом биореакторе. Для перемешивания сточных вод с активным илом и насыщения иловой смеси растворенным кислородом воздуха предлагается использовать поверхностные турбоаэраторы. Новая технология биокаталитической очистки сточных вод позволит существенно сократить экономические затраты, время и обеспечить полное удаление азотных соединений из сточных вод.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ГН 2.1.5.1315-03. С изменениями от 28 сентября 2007 г. - Предельно допустимые концентрации (пдк) химических веществ в воде водных объектов хозяйственно-питьевого и культурно-бытового водопользования. – Минздрав России.

УДК: 547.022

Низаметдинова Лиана Альбертовна

## ИССЛЕДОВАНИЕ S-ТИОЛИРОВАНИЯ L-ЦИСТЕИНА МЕТОДОМ ИК СПЕКТРОСКОПИИ МНПВО

Руководители: А.Г. Мустафин, Т.В. Берестова

Башкирский государственный университет, Уфа  
Кафедра физической химии и химической экологии

Биологическую значимость и метаболическую функцию в организме серосодержащих аминокислот, в частности, *L*-цистеина, трудно переоценить. Однако, функциональные возможности тиолов и механизм их действия в организме до сих пор остается предметом активных обсуждений.

В данной работе изучено взаимодействие *L*-цистеина с солями металлов и серосодержащих анионов ( $\text{SO}_4^{-2}$ ,  $\text{SO}_3^{-2}$ ,  $\text{S}_2\text{O}_3^{-2}$ ) в условиях различной кислотности среды. Установлено, что в этом случае реакция проходит по пути окисления исходной аминокислоты, а комплексы металлов [1] не образуются.

Методом ИК спектроскопии МНПВО показано, что основным продуктом окисления *L*-цистеина с участием серосодержащих анионов является *L*-цистин. В этом случае, окисление *L*-цистеина до *L*-цистина происходит с невысокой скоростью, а выход дисульфида достигает 99%. Установлено, что данный окислительно-восстановительный процесс осуществляется с через образование сульфосодержащих соединений и сульфокислот различного строения. Определены промежуточные продукты окисления *L*-цистеина и сделаны отнесения их характеристических полос поглощения в средневолновой области ИК спектра.

Структура полученных соединений доказана с применением встречного синтеза *L*-цистеинсульфата [2] и *L*-цистеинсульфоновой кислот [3], а также другими физико-химическими методами анализа ЯМР спектроскопией и ESI –масс-спектрометрией.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Berestova T.V., Khursan S.L., Mustafin A.G. Experimental and theoretical substantiation of differences of geometric isomers of copper(II)  $\alpha$ -amino acid chelates in ATR-FTIR spectra // J. Spectrochim. Acta, Part A. 2020, V. 229. p. 117950.
2. Zecchini M., Lucas R., Gresley A. L. New Insights into the Cystine-Sulfite Reaction // Molecules. 2019, №. 24. p. 2377.
3. Darkwa J., Olojo R., Chikwana E., Simoyi R.H. Antioxidant Chemistry: Oxidation of *L*-Cysteine and Its Metabolites by Chlorite and Chlorine Dioxide // J. Phys. Chem. 2004, №. 108. p. 5576–5587.

УДК: 544.342-14

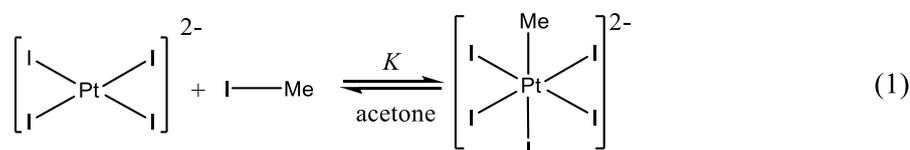
Никитенко Денис Валерьевич

## DFT-ОЦЕНКА ВЕЛИЧИНЫ КОНСТАНТЫ РАВНОВЕСИЯ ОКИСЛИТЕЛЬНОГО ПРИСОЕДИНЕНИЯ MeI К PtI<sub>4</sub><sup>2-</sup> В РАСТВОРЕ АЦЕТОНА

Руководители: Т.В. Краснякова, С.А. Митченко

Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко, г. Донецк  
Отдел исследований электрофильных реакций

Оптимизация геометрии метильного комплекса платины(IV) Me-PtI<sub>5</sub><sup>2-</sup> и оценка значения константы равновесия (1) осуществлялись с использованием пакета программ GAUSSIAN 09 [1].



Растворитель (ацетон) учитывался в модели IEFPCM. Величина константы равновесия оценивалась как:

$$K = \exp\left(-\frac{\Delta(\varepsilon_0 + \varepsilon_{ZPE})}{R \cdot T}\right).$$

Анализ результатов расчетов различными методами в разных базах показал, что только метод B3LYP с базисом LANL2DZ, применяемым для всех атомов, дает значение  $K$ , близкое к экспериментально полученной [2] величине константы равновесия  $K_{\text{эксп}}$  (табл.).

Таблица

Изменение энергии нулевых колебаний  $\Delta(\varepsilon_0 + \varepsilon_{ZPE})$ , значения рассчитанной ( $K$ ) и экспериментальной ( $K_{\text{эксп}}$ ) констант равновесия.

Метод/базис	$\Delta(\varepsilon_0 + \varepsilon_{ZPE})$ , кДж/моль	$K$	$K_{\text{эксп}}$
B3LYP/LANL2DZ	8,868	0,027	0,017
B3LYP/SDD&6-311++g(d)	3,405	0,252	
B3LYP/SDD	-0,464	1,206	
B3LYP/LANL2DZ&6-311++g(d)	-4,064	5,161	
PBE1PBE/LANL2DZ	-21,145	5110,165	
PBE1PBE/SDD&6-311++g(d)	-24,275	18083,69	
PBE1PBE/SDD	-28,063	83504,74	

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Frisch M. J. et al. Gaussian 09, Revision D.01, 2009.
2. Mitchenko S.A., Khazipov O.V., Mitchenko E.S., Krasnyakova T.V., J. Organomet. Chem. 752 (2014) 91.

УДК: 577.1:543.422.27

Новоженин Дмитрий Юрьевич

## ВЛИЯНИЕ КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ НА ПРОЦЕСС САМООРГАНИЗАЦИИ В ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОМ РАСТВОРЕ

Руководители: А.Н. Адамян, П.М. Пахомов

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Увеличение числа инфекционных заболеваний и случаев их развития оказывают сокрушительное воздействие на качество жизни населения и экономику стран. В настоящее время использование антисептиков в нашей жизни стало обыденным делом. В связи с этим во всем мире активно разрабатываются безотходные технологические способы изготовления жизненно важных продуктов. Актуальна разработка дезинфицирующих средств, которые будут иметь выгодные по соотношению эффективности и цене производства в пролонгированной лекарственной форме. Большой научный и практический интерес представляют супрамолекулярные гидрогели ЦСР, основанные на низкоконцентрированных (0,01%) водных растворах L-цистеина и  $\text{AgNO}_3$ , где оба прекурсора биоактивны. Введение электролитов (сульфат натрия) в раствор ЦСР инициирует процесс гелеобразования. Интересно, что существуют многослойные материалы на основе КМЦ, которые содержат в полислоях антибактериальные агенты.

В настоящей работе исследованы вязкостные и структурные свойства растворов на основе карбоксиметилцеллюлозы (КМЦ) и ЦСР. Установлено, что однородный оптически прозрачный раствор образуется после смешивания водного раствора ЦСР ( $\text{Ag}^+$  /L-цистеин 0,01 %) с водным раствором КМЦ (1,0 % и 2,0 %). А образование оптически прозрачного геля происходит спустя 30 минут после смешивания ЦСР и КМЦ. Прочность образованного геля зависит от содержания КМЦ. Система с 2% КМЦ дольше сохраняет прочность геля по отношению к системе с 1% КМЦ. Согласно данным УФ спектроскопии при введении в ЦСР 1% (0.0375 мл) КМЦ происходит сдвиг основных полос поглощения ЦСР (310 и 390 нм) к значениям 319 и 397 нм, а уже при 2% (0.0375 мл) появляются новые полосы поглощения - 258 и 287 нм. Сам раствор КМЦ полос поглощения не имеет. Это может свидетельствовать о матричной структуре раствора КМЦ–ЦСР, в котором супрамолекулярные цепочки ЦСР встроены в сетку из молекул КМЦ.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №20-33-90096) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.*

УДК: 661.7437

Околота Дарья Александровна

**ДИМЕРНЫЕ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫЕ ВЕЩЕСТВА  
НА ОСНОВЕ МНОГООСНОВНЫХ КИСЛОТ**

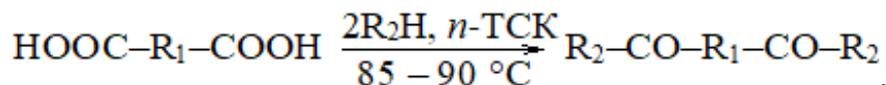
Руководитель: С.А. Темникова

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра органической химии

Димерные поверхностно-активные вещества (ПАВ) привлекают внимание исследователей тем, что обладают рядом особых свойств по сравнению с мономерными ПАВ. Они имеют низкие значения критической концентрации мицеллообразования (ККМ); в растворе образуют разные морфологические структуры; обладают хорошими солубилизирующими и эмульгирующими свойствами; проявляют хорошее смачивающее действие.

В работе синтезированы диэфиры общей формулы  $R_2-CO-R_1-CO-R_2$  путём взаимодействия дикарбоновых кислот (глутаровая, адипиновая) с неионогенных ПАВ (неонол АФ-6,9; неонол АФ-10,9; синтанол АЛМ-7). В качестве катализатора была использована *n*-толуолсульфокислота (*n*-ТСК).

Общая схема реакций:

где  $R_1 = (CH_2)_3$  или  $(CH_2)_4$ , $R_2 = C_{12}H_{25}(C_2H_4O)_7O-$  или  $C_9H_{19}-C_6H_4-O-(C_2H_4O)_n-$ .

Строение полученных веществ было подтверждено данными ИК-спектроскопии. Для синтезированных веществ были исследованы коллоидно-химические свойства их водных растворов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Е.А. Ломинога, К.С. Бурмистров, В.С. Гевод. Синтез димерных поверхностно-активных веществ на основе синтанола ДС-10 и адипиновой кислоты. Изв. вузов. Химия и хим. Технология. 2018, Т. 61. Вып.2, С.91-95.
2. Rosen, Milton J. Surfactants and interfacial phenomena / Milton J. Rosen, Joy T. Kunjappu. – 4th ed. – New Jersey: A John Wiley & Sons, Inc., 2012. – 600 p.
3. Karsa D. R. Industrial Applications of Surfactants IV. D. R. Karsa. – London: The Royal Society of Chemistry, 1999. – 286 p.

УДК: 544.03

Останин Степан Андреевич<sup>1</sup>

**МИКРОФАЗНАЯ СТРУКТУРА ПОЛИУРЕТАНОВ,  
ИССЛЕДОВАННАЯ МЕТОДОМ РЕЛАКСАЦИОННОЙ  
ТВЕРДОТЕЛЬНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР**

Руководитель: В.В. Зуев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Университет ИТМО, г. Санкт-Петербург

<sup>2</sup> ИВС РАН, г. Санкт-Петербург

В данном исследовании были изучены данные релаксации поперечной намагниченности образцов сегментированных полиуретанов с различной массовой долей жестких и подвижных перфторированных блоков. Были получены кривые релаксации, математическое описание и анализ которых позволили оценить молекулярную подвижность и объемную долю различных фаз в системе.

<sup>1</sup>H ЯМР с регистрацией эха Ханна был использован для измерения поперечной релаксации намагниченности ( $T_2$ ). Путем аппроксимации релаксационных кривых комбинацией функций гаусса и экспоненциальной функции мы смогли с высокой точностью получить составляющие этих функций. Было обнаружено, что исследованные системы состоят из трех фаз – жесткой псевдокристаллической фазы, подвижной фазы и жесткой аморфной фазы, имеющей промежуточную подвижность. Времена релаксации показали, что в образцах, содержащих большую долю мягких сегментов, часть их образует подвижную фазу, а другая часть участвует в образовании жесткой аморфной фазы. Введение ароматического удлинителя цепи, увеличивающего объем жестких сегментов, приводит к увеличению жесткости всей системы в целом, что принципиально меняет картину молекулярной подвижности и микрофазную организацию полиуретана. Ранее проведенные исследования молекулярной подвижности ПУ с использованием твердотельной ЯМР спектроскопии предполагали наличие четко обособленных аморфных фаз с выделенной межфазной границей. Наши исследования показали, что существует единая аморфная фаза с флуктуацией плотности, обусловленной формированием микросеток водородных связей. Образование жестких доменов определяется наличием и мольной долей уретановых связей и относительно слабо зависит от других факторов. Влияние термодинамических параметров проявляется в том, что при использовании смеси полиолов, более упорядоченная структура полимера с большей долей жестких доменов и жестких аморфных фаз формируется при их соотношении 1 к 1.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №20-33-90001.*

УДК: 616.31:615.831

Папулова Арина Сергеевна

**ФОТОДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕРАПИЯ.  
ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРЫ,  
ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В СТОМАТОЛОГИИ**

Руководители: Г.Е. Бордина, Н.П. Мсхвильдзе

Тверской государственной медицинский университет, Тверь  
Кафедра химии

Применение метода фотодинамической терапии (ФДТ), согласно данным медицинской статистики, в  $\frac{3}{4}$  случаях не только исключает рост инфекции условно-патогенного типа, но и позволяет уничтожить нехарактерных для ротовой полости энтеробактерий и микозных форм, что является выгодным преимуществом фотодинамического воздействия.

Целью работы является анализ свойств фотосенсибилизаторов (ФС) и возможность применения данных препаратов в стоматологической практике. Важным аспектом при лечении воспалительных заболеваний в стоматологии является антибактериальный эффект, который достигается при использовании лазера в сочетании с ФС, вызывающим при воздействии световой энергии образование синглетного кислорода, который разрушает мембрану и приводит к уничтожению микробной клетки. Исследования показали, что в стоматологии используются ФС разных групп в виде гелей для аппликационного нанесения. В большинстве случаев применяют препараты-производные хлорина Е6 (например: Фотодитазин, представляющий собой зеленоватый гель). Выгодным отличием данного препарата является его природное происхождение (сырьем для производства служит зеленая микроводоросль *Spirulina Platensis*) и способность хорошо растворяться в белково-липидных клетках, что повышает результативность лечения. Фотодитазин может применяться при повышенной чувствительности зубов к лекарственным средствам, так как не вызывает аллергических реакций, что является его положительной особенностью. Применение Фотодитазина осуществляется при следующих заболеваниях: кариес, хронический и острый гингивит, альвеолит, воспалительные процессы.

На основании данных из литературных источников при рассмотрении теоретически механизма действия и химической структуры различных ФС выяснено, что лекарственный препарат Фотодитазин является одним из наиболее безопасных ФС, применяемых в ФДТ. В работе также перечислены особенности методики фотодинамической терапии, позволяющие эффективно использовать ее при различных заболеваниях полости рта.

УДК: 53.087.9

Петров Роман Андреевич

## РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ВЛАЖНОСТИ ЛЬНОТРЕСТЫ

Руководитель: А.В. Малышкин

Тверской государственной университет, г. Тверь  
Кафедра общей физики

Измерение уровня влажности является важной задачей, так как превышение определенного уровня влажности может привести к конденсации, коррозии, образованию плесени или другим проблемам. Применения материалов с повышенным уровнем влажности или, наоборот, с пониженным, влекут за собой необратимые последствия. Благодаря влагомеру можно определить допустимый уровень влажности продукта или изделия. Таким образом, без них невозможно было бы предотвратить проблемы, которые появляются из – за избытка или недостатка влажности. Одна из таких сфер, где необходим контроль уровня влажности – сельское хозяйство.

В данной работе проводилась разработка устройства измерения влажности льнотресты на микроконтроллерном управлении (Рис). Данное устройство состоит из: источника питания, логарифмического усилителя, блока обработки сигнала на базе микроконтроллера и блока индикации.

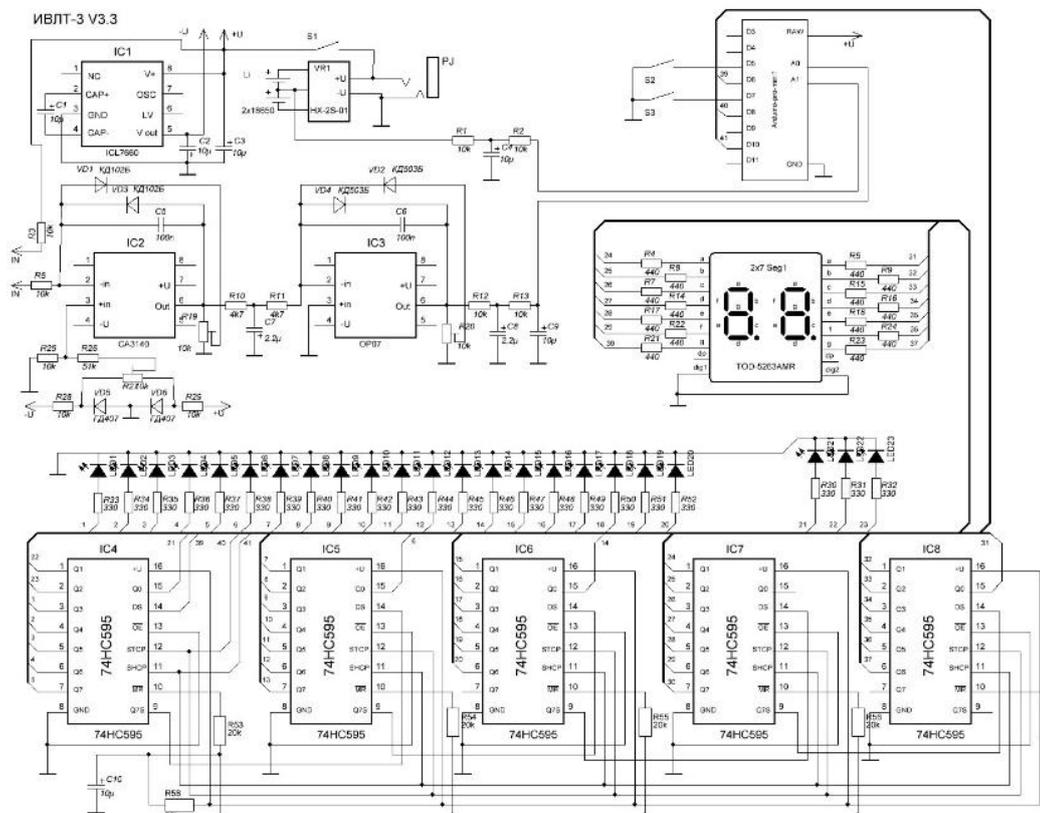


Рис. Принципиальная схема устройства измерения влажности

УДК: 544.147.3

Петров Владимир Романович

**САМООРГАНИЗАЦИЯ В НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ  
ВОДНЫХ РАСТВОРАХ НА ОСНОВЕ L-ЦИСТЕИНА,  
N-АЦЕТИЛ-ЦИСТЕИНА И АЦЕТАТА СЕРЕБРА  
С МОЛИБДАТОМ НАТРИЯ**

Руководители: Д.В. Вишневецкий, Д.В. Аверкин

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Научный интерес вызывает изучение процессов самоорганизации супрамолекулярных систем на основе L-цистеина и N-ацетилцистеина с ацетатом серебра (ЦСРац и НАЦац, соответственно), так как биосовместимость и низкая концентрация активных веществ обеспечивают системам широкую область практического применения. Известно, что этим системам характерно наличие частиц с заряженной поверхностью в наноразмерной области. Практическим интересом с точки зрения усиления действия на патогенные микроорганизмы, а также с целью уменьшения их общей токсичности к организму человека, обладает введение в исследуемые супрамолекулярные растворы соли молибдата натрия ( $\text{Na}_2\text{MoO}_4$ ), так как известно, что наночастицы вида  $\text{Ag}_2\text{MoO}_4$  и  $\text{Ag}/\text{Ag}_2\text{MoO}_4$  инициируют фотокаталитические процессы разрушения бактерий. Фоточувствительность наночастиц  $\text{Ag}_2\text{MoO}_4$  и  $\text{Ag}/\text{Ag}_2\text{MoO}_4$  возможно применять в способах фотохимиотерапии кожных заболеваний и лечении различных ЛОР-заболеваний.

Установлено, что при введении 0,025 мл молибдата натрия в 1 мл прекурсора ЦСРац (3 мМ) происходит образование слабого гидрогеля (динамическая вязкость порядка 4,5 мПа·с). Методом УФ-спектроскопии наблюдается снижение интенсивности пиков поглощения 315 нм и 265 нм, соотносящихся к комплексам  $\text{Ag}^+/\text{LCys}$  в основе супрамолекулярной цепочки, при этом наблюдается увеличение поглощения при длине волны от 390 нм. Данные, полученные методом измерения дзета-потенциала указывают на скачкообразное укрупнение наноразмерных частиц от плюс 55 мВ до плюс 90 мВ, в дальнейшем заряд уменьшается до плюс 60 мВ и далее до плюс 40 мВ. Методом ДСР регистрируется бимодальное распределение агрегатов по размерам с модами ~150 нм и ~600 нм, при этом исходные размеры частиц ЦСРац составляют ~120 нм. Воспроизведение эксперимента на системе НАЦац доказывает, что источником серебра для реакции образования  $\text{Ag}_2\text{MoO}_4$  являются комплексы  $\text{Ag}^+/\text{LCys}$ . Облучение гидрогеля ЦСРац с  $\text{Na}_2\text{MoO}_4$  при длине волны 365 нм доказывает фотокаталитическую активность системы за счет уменьшения пропускания при длине 395 нм и образование кислорода в объеме гидрогеля.

УДК: 541.64:541.49

Платонов Илья Андреевич

## **ВЛИЯНИЕ БОРОСОДЕРЖАЩИХ МИКРОУДОБРЕНИЙ НА УРОЖАЙНОСТЬ СОРТОВ КАРТОФЕЛЯ**

Руководитель: О.В. Шилова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г.Тверь  
Кафедра агрохимии и земледелия

В настоящее время среди большого разнообразия предлагаемых для органического земледелия комплексов экологически безопасными соединениями являются: этилендиаминдиантарная кислота (ЭДДЯК), иминодиантарная кислота (ИДЯК) и др. Однако об эффективности их хелатированных комплексов с металлами или неметаллами (в том числе бора) на рост и развитие культур имеются немногочисленные научные публикации. В связи с этим, в полевых и лабораторных условиях было изучено влияние боросодержащего комплексоната (В-ЭДДЯК) в качестве некорневой подкормки на неудобренном или удобренном фонах питания в сравнении с борной кислотой.

На протяжении всех сроков проведения исследований наибольшим содержанием нитратов, фосфатов и обменного калия отличались варианты с минеральными удобрениями, особенно в сочетании с В-ЭДДЯК. Варианты без использования удобрений заметно уступали удобренным фонам, однако применение комплексоната бора по сравнению с борной кислотой привело к некоторому увеличению подвижных форм элементов питания в почве (в среднем на 2,2 – 4,3 мг/кг).

Обработка растений боросодержащими растворами увеличивало продуктивность картофеля обоих сортов в среднем на 2–3 ц/га. Наибольшая урожайность клубней по отношению к контролю получена на варианте с применением боратного комплекса на минеральном фоне (247 ц/га – у сорта «Гала» и 234 ц/га – у сора «Венета»). Опрыскивание растений  $\text{H}_3\text{BO}_3$  на неудобренном фоне по сравнению с контролем привело к увеличению выхода клубней в среднем на 5,1 – 5,5%, а на удобренном фоне – к увеличению урожайности картофеля на 14,5% (у сорта «Гала») и на 15,8% (у сорта «Венета»). Следует отметить, что опрыскивание растений борной кислотой на неудобренном фоне позволило увеличить содержание крахмала в клубнях картофеля обоих сортов на 30,1–31,34%, а обработка растений В-ЭДДЯК – на 32,4–33,9% по сравнению с контролем. Наибольшим содержанием витамина С отличались клубни, выращенные на варианте с обработкой комплексонатом бора (13,2 мг/100 г сырого вещества), что на 1,2 мг/100 г сырого вещества (или на 16,5 %) больше по сравнению с борной кислотой. Использование хелатированного бора привело к большему накоплению биофлавоноидов в клубнях (58 мг/100 г сырого вещества), что на 10 мг/100 г сырого вещества (или на 23,2 %) больше по отношению к контрольным значениям.

УДК: 544.473

Пономарчук Елизавета Евгеньевна

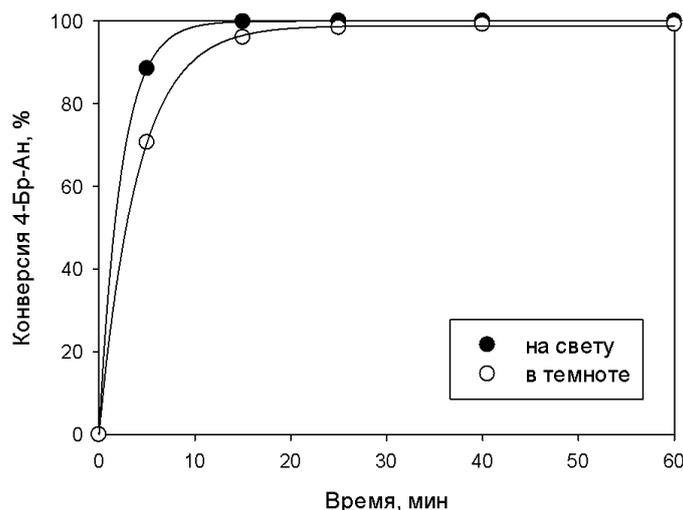
## ИССЛЕДОВАНИЕ ФАКТОРОВ, ВЛИЯЮЩИХ НА СКОРОСТЬ ПРОТЕКАНИЯ РЕАКЦИИ СУЗУКИ В ПРИСУТСТВИИ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

Тверской государственный технический университет, г. Тверь  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Семейство катализируемых палладием реакций кросс-сочетания представляет одну из наиболее быстро развивающихся областей катализа. Реакция кросс-сочетания Сузуки является масштабируемой и экономически эффективной для использования в синтезе промежуточных продуктов получения различных фармацевтических препаратов.

В рамках данной работы на примере реакции кросс-сочетания 4-броманизола (4-БрАн) и фенилбороновой кислоты были исследованы каталитические свойства следующих биметаллических образцов на основе сверхсшитого полистирола марки MN100: 0.5%Pd-2%Au/MN100 и 1%Pd-2%Au/MN100. Образцы катализаторов были предварительно обработаны в токе  $H_2$  в течение 3 ч при  $300^\circ C$ . Реакция Сузуки проводилась при температуре  $60^\circ C$  в присутствии NaOH при использовании в качестве растворителя смеси этанол-вода (4:1). В результате проведенных исследований было показано, что скорость реакции пропорциональна содержанию палладия в катализаторе. Кроме того, для образца 1%Pd-2%Au/MN100 было обнаружено, что скорость превращения 4-БрАн снижается в отсутствие света.



Также была исследована стабильность катализаторов. Показано, что при повторном использовании 0.5%Pd-2%Au/MN100 конверсия 4-БрАн, достигаемая за 40 мин реакции, снижается со 100% до 72%.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №20-19-00386).*

УДК: 66

Прожикин Дмитрий Дмитриевич

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НИЗКОПОТЕНЦИАЛЬНОГО ТЕПЛА В АММИАЧНОМ ПРОИЗВОДСТВЕ

Руководитель: А.В. Тихомирова

Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачёва, г. Кемерово  
Кафедра химии, технологии неорганических веществ и наноматериалов

На сегодняшний день проблема получения, а главное, сохранения энергии стоит максимально остро, для каждой технологии. Решением проблемы энерго- и ресурсосбережения может стать использование низкопотенциального тепла.

Запасы такого рода тепла огромны, что дает возможность использовать его не только в пределах одного производства, но и в близлежащих районах, как технического, так и бытового назначения.

Существует несколько вариантов использования низкопотенциального тепла на аммиачном производстве. Производство аммиака относится к энерготехнологической схеме производства, где получают пар среднего давления (109 кгс/см<sup>2</sup>), который используют для сжатия азотоводородной смеси в стадии синтеза аммиака. Отработанный пар имеет давление 40 кгс/см<sup>2</sup>, и частично идет на смешение с природным газом на начальном этапе производства.

Примерно 20 т турбинного конденсата с температурой 55-65 °С используется для подпитки водяных рубашек конвертора метана 2-ой ступени и водяных рубашек котлов-утилизаторов, следующих после конвертора. При этом количество только турбинного конденсата, ежедневно, составляет около 130 т. Если воспользоваться стандартной формулой расчёта количества теплоты, при охлаждении данного объема конденсата даже на 10 °С, то получим 5460 ГДж или 1304 Гкал.

Это позволяет сделать вывод об огромных запасах энергии, которая уходит в атмосферу. А её использование может позволить сохранить такие тепловые ресурсы, как уголь, нефть и газ еще на долгие годы.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Низкопотенциальное тепло – Большая Энциклопедия Нефти и Газа. (<https://www.ngpedia.ru/id508432p1.html>)
2. Утилизация низкотемпературных ВЭР. ([https://studref.com/553051/tehnika/utilizatsiya\\_nizkotemperaturnyh\\_nizkopotentsialnyh](https://studref.com/553051/tehnika/utilizatsiya_nizkotemperaturnyh_nizkopotentsialnyh))

УДК: 577.1:543.422.27

Прокофьева Софья Денисовна

## **ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССА ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ В СИСТЕМЕ НА ОСНОВЕ L-ЦИСТЕИНА, НИТРАТА СЕРЕБРА И КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ**

Руководители Д.В. Вишневецкий, А.Н. Адамян

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Природные и искусственные объекты с супрамолекулярной структурой играют важную роль при разработке новых биологически активных препаратов. Изучение систем на основе L-цистеина и солей серебра вызывает большой интерес с научной и практической точек зрения. Введение в систему электролитов вызывает процесс гелеобразования. Выяснилось, что цистеин-серебряный раствор (ЦСР) с водным раствором карбоксиметилцеллюлозы (КМЦ) хорошо совместимы друг с другом. Наиболее важным свойством КМЦ является способность формировать вязкий раствор, длительное время не утрачивающий своих свойств.

В данной работе исследованы вязкостные и структурные свойства растворов на основе КМЦ и ЦСР при введении в систему сульфата натрия с помощью таких физико-химических методов, как УФ-спектроскопия и вискозиметрия. Для приготовления геля брали созревший водный раствор ЦСР, водный раствор КМЦ (2,0%) и 0.05 мл сульфата натрия. Через 30 минут происходит образование оптически прозрачного геля. Выяснилось, что введение электролита в систему (ЦСР-КМЦ) увеличивает вязкость полученного гидрогеля. Рассмотрение электронных спектров растворов показало, что при введении в ЦСР 2% (0.0375 мл) КМЦ полосы поглощения 310 и 390 нм исчезают, а уже при введении 0.05 мл сульфата натрия появляются новые полосы поглощения ~256 и 287 нм, которые свидетельствуют об участии сульфат-иона в процессе гелеобразования.

В результате проведенных исследований выяснилось, что наблюдается гелеобразование на системе L-цистеина, нитрата серебра, КМЦ и сульфата натрия, причем значение динамической вязкости такой системы выше, чем значение вязкости гидрогеля без сульфата натрия, что позволит получить из такого раствора пленку с заданными свойствами. Такие пленки найдут применения в различных отраслях медицины.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №20-33-90096) на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.*

УДК: 661.1

Просьяник Юлия Андреевна

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕНООБРАЗУЮЩИХ СВОЙСТВ СМЕСЕЙ СИНТАНОЛОВ И ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ

Руководитель: Н.В. Веролайнен

Тверской государственный университет  
Кафедра органической и биоорганической химии

Пену характеризуют, как крупную дисперсию газа в жидкости, где газ занимает основной фазовый объем. Пены имеют тенденцию сжиматься в виду действия сил поверхностного натяжения, поэтому пониженное значение поверхностного натяжения является необходимым требованием для хороших пенообразующих свойств исследуемых растворов веществ [1].

В работе рассмотрены свойства смесей на основе синтанолов ДС-4, ДС-10, ДС-20, полиэтиленгликоля-100 (ПЭГ-100), полиэтиленгликоля-115 (ПЭГ-115). Сравнивали, как двухкомпонентные, так и трехкомпонентные смеси с различными процентными соотношениями веществ. Исследованы пеноустойчивость, пенообразующая способность и кратность пены смесей. Показано, что смеси, содержащие синтанол ДС-20, обладают ярко выраженными пеногасящими свойствами, а с синтанолом ДС-10 – пенообразующими (Рис.).

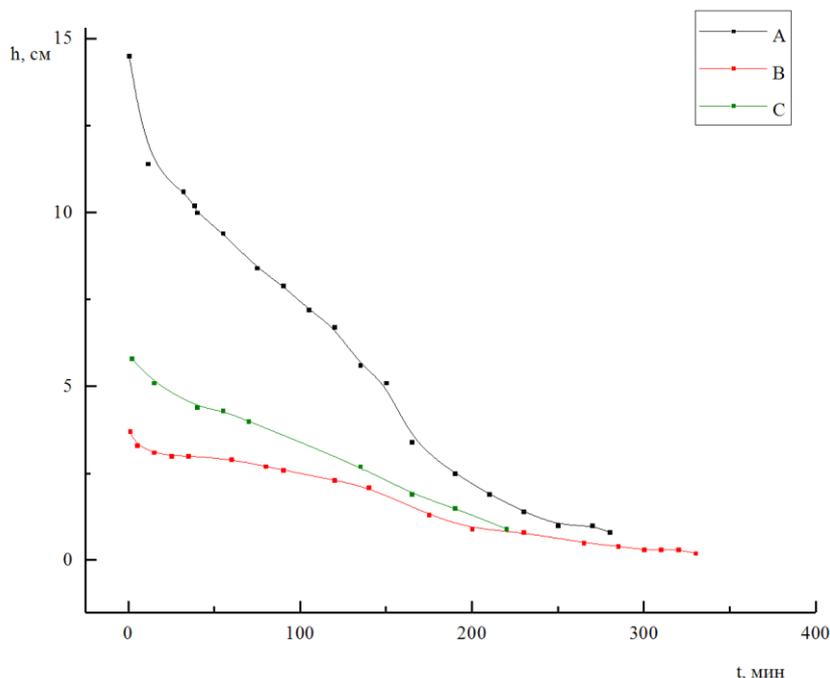


Рис. Зависимость высоты пены (h) от времени ее оседания (t):  
А – ДС-10,  
В – ДС-20,  
С – ДС-4.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Холмберг К., Йенссон Б., Кронберг Б., Линдман Б. Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах/ Холмберг К.– М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2015. – 530 с.

УДК: 542.973+544.473-039.63-386

Радин Александр Сергеевич

**ХИМИЧЕСКИЕ ГАЗОВЫЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ ПЛЕНКИ  
ИЗ НАНОЦЕЛЛЮЛОЗЫ МОДИФИЦИРОВАННОЙ  
ФОСФОРНОВОЛЬФРАМОВОЙ ГЕТЕРОПОЛИКИСЛОТОЙ  
ТИПА ДОУСОНА**

Руководитель: М.А. Феофанова

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Разработан сорбционно-импедансный химический сенсор на основе фосфорновольфрамовой гетерополикислоты (ГПК) типа Доусона  $H_6[P_2W_{18}O_{62}]$ , иммобилизованной в пленке наноцеллюлозы.

Наноцеллюлоза новый современный материал, представляющий из себя набор целлюлозных наноразмерных волокон шириной от 5 до 20 нм и продольным размером от 10 нм до нескольких микрон. Уникальные свойства данного материала и возможность получения из него тонких пленок позволили создать тонкопленочный газовый сенсор на ряд газообразных веществ.

Выбор гетерополикислоты типа Доусона в качестве модифицирующей добавки был обусловлен ее способностью к обратимым многоэлектронным и многопротонным переходам в ходе окислительно-восстановительных реакций с определяемыми газообразными веществами. В ходе таких процессов обратимо изменяются электрофизические свойства чувствительной пленки, в частности ее электрическое сопротивление, что позволяет регистрировать концентрацию измеряемого газообразного компонента.

Разработанный на основе модифицированных гетерополикислотой пленок наноцеллюлозы тонкопленочный химический сенсор, позволяет изготавливать сенсоры групповыми методами. По этому принципу были изготовлены сенсоры на сероводород, монооксид углерода и монооксид азота с чувствительностью на уровне ПДК и выше. Сенсоры такого типа обладают высокой чувствительностью, быстроедействием, хорошей взаимозаменяемостью и стабильностью характеристик, малым энергопотреблением и низкой стоимостью при серийном изготовлении. Градуировочные характеристики чувствительного слоя позволяют применять данные сенсоры в современных газоанализаторах.

УДК: 547/821/3

Рассказова Наталья Юрьевна

## ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ РАСТВОРОВ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ N-АЛКИЛПИРИДИНИЯ

Руководитель: О.Е. Журавлёв

Тверской государственный университет  
Кафедра органической химии

Ионные жидкости (ИЖ) представляют собой класс солей, являющихся жидкостями с низкими температурами плавления (ниже 100°C). В настоящее время ионные жидкости используются в качестве растворителей, катализаторов, электролитов для аккумуляторных батарей. В связи с этим представляет большой интерес изучение влияния структуры органического катиона и природы аниона в составе ионной жидкости на свойства их растворов, в частности на электропроводность (ЭП).

Нами были синтезированы ИЖ с гексафторфосфат- и тетрафторборат-анионами и катионом N-алкилпиридиния с различной длиной алкильных заместителей ( $\text{CH}_3$ ,  $\text{C}_4\text{H}_9$ ,  $\text{C}_8\text{H}_{17}$ ,  $\text{C}_{10}\text{H}_{21}$ ). Прекурсорами для получения ИЖ по реакции метатезиса выступали галогениды N-алкилпиридиния.

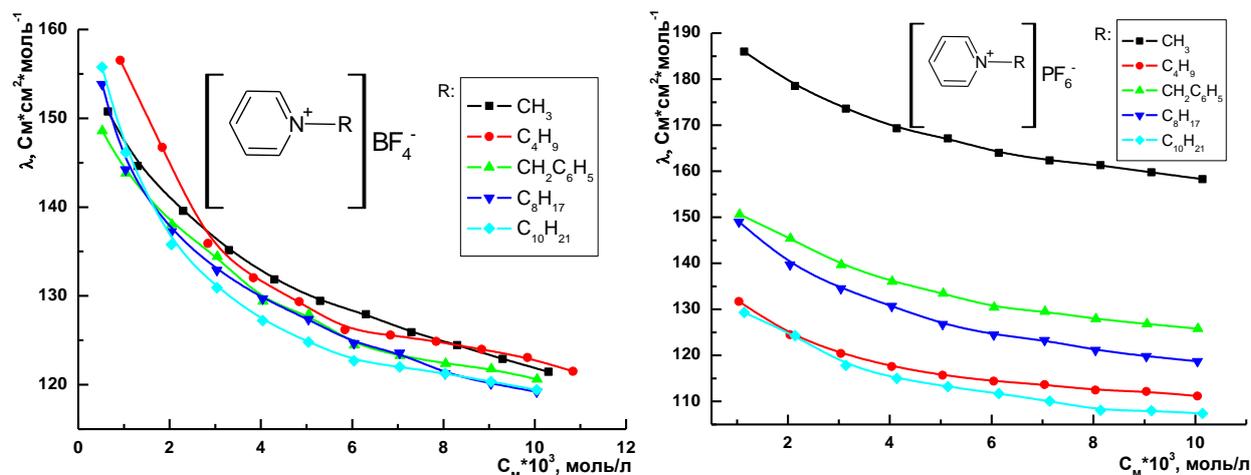


Рис. 1. Зависимость эквивалентной ЭП разбавленных растворов тетрафторборатов и гексафторфосфатов N-алкилпиридиния в ацетонитриле при 25°C.

Результаты анализа кондуктометрических данных показывают, что эквивалентная ЭП изученных ИЖ увеличивается с разбавлением раствора. ЭП растворов гексафторфосфатов N-алкилпиридиния оказалась ниже, чем тетрафторборатов с одноименными катионами. Такой эффект может быть связан с меньшей подвижностью гексафторфосфат-аниона в растворе по сравнению с тетрафторборат-анионом.

УДК: 54/057

Ребрищева Наталья Александровна

## СИНТЕЗ МАГНИТНЫХ БИОКАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ ИММОБИЛИЗОВАННОЙ ПЕРОКСИДАЗЫ КОРНЯ ХРЕНА

Руководитель: О.В. Гребенникова

Тверской государственный технический университет, г. Тверь  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

В последние несколько десятилетий в вопросах рационального проектирования широко используется технология иммобилизации ферментов. Иммобилизация является альтернативным подходом к биокатализу с рядом преимуществ и адаптивностью к автоматизации. Подходы, основанные на иммобилизации, представляют собой простые, но эффективные пути для разработки ферментных катализаторов с более высокой активностью, чем первоначальные аналоги. Иммобилизация пероксидаз в или на нерастворимые опорные носители выгодна для практического применения благодаря удобству в обращении, легкости выделения ферментов из реакционной смеси и возможности повторного использования. В данной работе синтезировались две биокаталитические системы на основе иммобилизованной пероксидазы корня хрена (HRP). Синтез магнитных наночастиц осуществляли методом соосаждения. Затем разработали методику синтеза биокаталитических систем, используя необработанные (катализатор обозначался как  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{АПТС}/\text{ГА}/\text{HRP}$ ) и предварительно обработанные тетраэтоксисиланом (катализатор обозначался как  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{SiO}_2/\text{АПТС}/\text{ГА}/\text{HRP}$ ) магнитные наночастицы. Активность полученных катализаторов изучалась спектрофотометрическим методом. В качестве окисляемого субстрата был выбран 2,2'-азино-бис(3-этилбензотиазолин-6-сульфонат) аммония, который при окислении пероксида водорода в присутствии HRP дает голубое окрашивание.

В ходе экспериментов выяснилось, что наибольшую активность показал катализатор  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{SiO}_2/\text{АПТС}/\text{ГА}/\text{HRP}$ . Именно поэтому этот биокатализатор использовался при нахождении оптимальной температуры. Оптимальными температурами являются  $-30^\circ\text{C}$  и  $45^\circ\text{C}$ . При данных температурах катализатор  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{SiO}_2/\text{АПТС}/\text{ГА}/\text{HRP}$  показал лучшие результаты. Таким образом, полученные биокатализаторы могут с успехом использоваться в биокатализе, включая процессы окисления фенольных соединений.

*Работа выполнена в рамках гранта СП-4543.2021.4.*

УДК: 544.463:532.612:631.4

Рогатко Марина Игоревна

## РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РАСТВОРОВ ЭТОКСИЛИРОВАННЫХ ГУМИНОВЫХ КИСЛОТ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ЖИДКОСТЬ-ГАЗ

Руководитель: С.Л. Хилько

ГУ «Институт физико-органической химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко», г. Донецк

Актуальной задачей современной химии является разработка методов направленной химической модификации природных соединений с целью создания новых типов эффективных продуктов с заданными свойствами [1]. При введении в состав макромолекулы природных полиэлектролитов, гуминовых кислот (ГК), оксиэтиленовых групп  $(-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-)_n$  возможно получение нового вида ПАВ, совмещающего анионоактивные, за счет присутствующих в макромолекулах ГК  $-\text{COOH}$  и  $-\text{OH}$  групп, и неионогенные свойства за счет оксиэтиленовых групп.

Твердофазную реакцию этоксилирования ГК проводили совместно с полиэтиленгликолем (ПЭГ-6000 и ПЭГ-1500) в вибрационном аппарате 75Т-ДрМ при частоте вибрации  $\nu = 50$  Гц и амплитуде  $A = 3.0 \div 5.0$  мм. Дилатационный модуль вязкоупругости ( $|E|$ , мН/м) измеряли методом формы осциллирующей капли (тензиометр PAT-2P SINTERFACE Technologies, Germany).

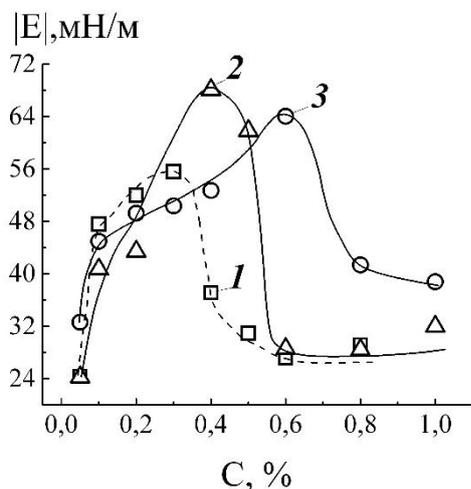


Рис. Зависимость модуля вязкоупругости  $|E|$  от концентрации растворов: 1 – ГН, 2 – ГНГК+ПЭГ-6000, 3 – ГНГК+ПЭГ-1500.

Как следует из рисунка, зависимости  $|E| = f(C)$  для исходного образца гумата натрия и его модифицированных производных имеют выраженный максимум. Для образца гумата натрия (ГН) максимальное значение величины  $|E| = 56$  мН/м наблюдается при  $C = 0.2\%$ , для образца ГНГК+ПЭГ-6000  $|E|_{max} = 68$  мН/м – при  $C \approx 0.4\%$ , а для образца ГНГК+ПЭГ-1500  $|E|_{max} = 65$  мН/м – при  $C \approx 0.6\%$ . Такие различия связаны с введением в состав макромолекулы ГК этоксигрупп с разной величиной  $n$ , что может быть обусловлено разной степенью механодеструкции ПЭГ-1500 и ПЭГ-6000 в результате твердофазной реакции с ГК.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Овчинников Ю.А. Биоорганическая химия. М.: Просвещение, 1987.

УДК: 662.756.3+544.478

Рудь Дарья Викторовна

## **ДЕОКСИГЕНИРОВАНИЕ ЖИРНЫХ КИСЛОТ В СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ**

Руководитель: А.А. Степачёва, к.х.н., доцент

Тверской государственной технической университет

Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Триглицериды, входящие в состав биомассы, являются источником высших жирных кислот. В зависимости от исходного сырья триглицериды могут иметь в своем составе пальмитиновую, стеариновую, линоленовую и леноленовую кислоту в различных соотношениях. Также возможным источником высших кислот могут служить животный жир и отработанные фритюрные жиры. Это позволяет решить проблему конкуренции сырья с пищевой промышленностью, и кроме этого является возможностью вторичного использования отходов предприятий общественного питания.

Наиболее распространенным методом конверсии жирных кислот в углеводороды является деоксигенирование. Топливо? получаемое данным методом обладает всеми преимуществами классического биотоплива, а также снижаются риски использования вредных растворителей. На современном этапе развития стоят задачи поиска наиболее эффективных параметров проведения процесса деоксигенирования. Реакциях протекает в трех фазах, поэтому на скорость реакции большое влияние оказывает процесс массопереноса. Для выхода в кинетическую область при использовании обычных растворителей необходимы жесткие условия, использование сверхкритических флюидов позволит в разы снизить параметры температуры и давления (с 300-500°C до 230°C и с 6МПа до 3 МПа при использовании n-гексана соответственно). Кроме этого сверхкритические жидкости является Н-донорами, что исключает необходимость дополнительного использования водорода.

Были проведены исследования различной смеси растворителей, состоящей из n-гексана и пропанола-2, в процессе деоксигенирования стеариновой кислоты, выбранной в качестве модельного соединения, было В качестве катализатора был выбрана система Ni/Fe, нанесенная на полимерную матрицу сверхсшитого полистирола гидротермальным методом. Реакция проводилась при температуре – 270 °С, парциальном давлении азота – 3 МПа, концентрации полученных результатов был определён механизм протекания процесса и выявлено, что при использовании чистого n-гексана реакция протекает по механизму деоксигенирования, а при добавлении пропанола-2 начинается процесс этерификации.

УДК: 615.322

Русаков Максим Вячеславович

## **СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА С ПОМОЩЬЮ ЭКСТРАКТОВ ЛИСТЬЕВ БЕРЁЗЫ ПОВИСЛОЙ**

Руководитель: С.Д. Хижняк, доцент, к.х.н.

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Кафедра физической химии

В настоящее время для синтеза наночастиц различных металлов применяются различные физические и химические процессы, которые позволяют получать наночастицы с необходимыми свойствами. Но несмотря на широкое распространение, это, зачастую дорогостоящие и трудоёмкие методы, которые могут оказывать негативное влияние и проявлять потенциальную опасность к окружающей среде и живым организмам. Таким образом, существует потребность в альтернативном и экологически безопасных и чистых методах производства наночастиц.

Целью данной работы является синтез наночастиц серебра при помощи экстрактов листьев берёзы повислой, собранных в зонах с различной антропогенной нагрузкой. Анализ способности образцов восстанавливать ионы серебра был проведен методом УФ-спектроскопии. Сбор растений был произведен 15 июня 2020 г. в пяти различных точках города Твери: СНТ «Светлый»; Парк Победы; Площадь Гагарина; ЖК «Volga Life»; мкрн. Мигалово; СНТ «Рябинки» - «фоновая зона».

Для проведения спектрального анализа листья берёзы были высушены и измельчены, а на их основе приготовлены водные экстракты. Регистрация спектров проводилась на спектрометре «Evolution Array» фирмы «Thermo Scientific» в кварцевой кювете с толщиной слоя 5 мм. Для синтеза наночастиц серебра в водные экстракты добавляли нитрат серебра  $\text{AgNO}_3$  и фиксировали поглощение в области 350–550 нм. через промежутки времени в 5 мин, 3 ч, 1 и 2 дня.

Эксперимент показал, что с течением времени в водных экстрактах берёзы повислой под влиянием биоактивных веществ, содержащихся в образцах, происходит восстановление ионов серебра. Стоит заметить, что образование наночастиц в экстрактах происходит с различной скоростью, это свидетельствует о разном количестве биоактивных веществ в исследуемых образцах, а также обнаружена зависимость между содержанием биоактивных веществ и размером наночастиц серебра, образованных в водных экстрактах. Анализируя полученные данные, можно выявить закономерность между антропогенной нагрузкой и способностью образцов восстанавливать ионы серебра.

*Данная работа выполнена на оборудовании ЦКП ТвГУ*

УДК: 543.4:581.1

Савина Ольга Дмитриевна

## СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ АНТОЦИАНОВ В ПЛОДАХ ЯГОДНЫХ РАСТЕНИЙ

Руководители: Т.И. Смирнова, О.В. Шилова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь

Кафедра агрохимии и земледелия

В представляемой работе спектрофотометрический метод анализа, широко применяемый при определении состава и качества пищевого сырья и продуктов питания, был использован для количественного определения антоцианов [1]. В рамках продвижения на рынок растительной продукции, обогащённой антоцианами, было выполнено исследование, целью которого было сравнить уровень содержания антоцианов в плодах дикорастущих и культивируемых в Тверской области ягодных растений. Указанные пигменты, не участвующие в процессах фотосинтеза, повышают устойчивость растений к стрессовым условиям окружающей среды, защищают фотосинтетический аппарат от избыточного светового облучения. На организмы человека и животных антоцианы оказывают воздействие, сходное с воздействием витамина Р: активизируют иммунитет, укрепляют стенки капилляров, препятствуют возникновению отёков. Суточная потребность человека в антоцианах – 200 мг [2,3]. Антоцианы обладают и бактерицидным действием, что способствует лучшей сохранности растительных продуктов, в состав которых они входят. Количественное определение суммы антоцианов в пересчёте на цианидин-3,5-диглюкозид было выполнено спектрофотометрическим методом в кислотном извлечении при длине волны 520 нм. В ягодах двенадцати растений: черники обыкновенной, аронии, черной и красной смородины, брусники, клюквы, черёмухи виргинской, земляники лесной, облепихи крушиновидной, крыжовника (красноплодного), малины ремонтантной красной и белой было обнаружено различное содержание антоцианов: максимальное количество (636 мг на 100 г сырой массы) – в ягодах черники, а минимальное (5 мг на 100 г сырой массы) – в ягодах малины ремонтантной белой. Хорошими источниками антоцианов могут служить арония, чёрная смородина, брусника и клюква, содержащие от 120 до 435 мг/ 100 г антоцианов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Волобуева В.Ф., Шатилова Т.И. Практикум по биохимии овощных, плодовых, ягодных, эфирноносных и лекарственных культур / М.: ФГОУ ВПО РГАУ-МСХА им. К.А. Тимирязева. 2008. 135 с.
2. Кучеренко Н.Е., Бабенюк Ю.Д., Васильев А.Н. и др. Биохимия. К.: Выща шк. Издательство при Киевском ун-те. 1988, 432 с.
3. Муравьёва Д.А., Самылина И.А., Яковлев Г.П. Фармакогнозия. М.: Медицина. 2002. 656 с.

УДК: 541.49:581.1

Савина Ольга Дмитриевна

## СЕЛЕНОСОДЕРЖАЩЕЕ УЛЬТРАМИКРОУДОБРЕНИЕ

Руководители: О.В. Шилова, Т.И. Смирнова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь  
Кафедра агрохимии и земледелия

Селен в растительных и животных организмах служит ультрамикрo-элементом, одной из основных функций которого является антиоксидантная [1]. В растительном мире селен является адаптогеном, т.е. повышает устойчивость как культивируемых, так и дикорастущих растений к неблагоприятным изменениям условий внешней среды [2]. С целью сравнения эффективности синтезированного на кафедре агрохимии и земледелия нового хелатного селеносодержащего комплекса на основе экологически безопасного комплексона этилендиаминдиантарной кислоты (Se-ЭДДЯК) и селенита натрия в качестве селеновых микроудобрений был поставлен мелкоделяночный опыт. Поскольку основную ценность зеленых овощей составляют биологически активные вещества (витамины, антиоксиданты и др.), было исследовано влияние испытываемых препаратов на их содержание (данные таблицы).

Таблица.

Изменение биологической активности петрушки обыкновенной  
под действием селеносодержащих препаратов

Состав раствора для обработки	Биологически активные вещества									
	Лист петрушки, мг/100 г сырого вещества								Корень петрушки, мг/100 г сырого вещества	
	Хлорофилл <i>a</i>		Хлорофилл <i>b</i>		Каротиноиды		β--каротин		Аскорбиновая кислота	
	2019	2020	2019	2020	2019	2020	2019	2020	2019	2020
H <sub>2</sub> O	130±3	103±1	57±2	31±1	68±1	77±1	0,98	1,07	32,1	33,8
Na <sub>2</sub> SeO <sub>3</sub>	148±1	116±1	52±2	29±2	81±2	85±1	1,29	1,24	34,0	33,4
ЭДДЯК	109±3	115±2	48±1	46±4	76±2	85±2	1,12	1,03	29,8	33,1
Se-ЭДДЯК	140±2	50±1	75±1	105±1	88±1	81±1	1,59	1,42	46,7	44,2

Селеносодержащие соединения оказали благоприятное воздействие на пигментный состав растений, вызвав увеличение содержания как хлорофиллов, так и каротиноидов, обладающих самостоятельной антиоксидантной активностью. При этом наибольший эффект выявлен на варианте с Se-ЭДДЯК, в отличие от варианта с селенитом натрия.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тутельян В.А., Княжев В.А., Голубкина Н.А. и др. /Селен в организме человека: метаболизм, антиоксидантные свойства, роль в канцерогенезе. – М.: Издательство РАМН. 2002. – 224 с.
2. Селен в биосфере (под ред. А.Ф. Блинохватова). – Пенза: РИО ПГСХА. 2001. – 324 с.

Сальникова Ксения Евгеньевна

## ИССЛЕДОВАНИЕ Ru/ПОЛИМЕРНОГО КАТАЛИЗАТОРА ПРИ ГИДРИРОВАНИИ ФУРФУРОЛА ДО ФУРФУРИЛОВОГО СПИРТА

Руководитель: В.Г. Матвеева, В.П. Молчанов

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра физической химии

Снижение доступности источников нефти и различные экологические проблемы повышают интерес к разработке экономически эффективных и экологически чистых технологий переработки биомассы в топливо и химикаты. В последнее время приобрела интерес модернизация переработки фурфурола, полученного из биомассы, что является потенциальной платформой для производства биотоплива и химикатов.

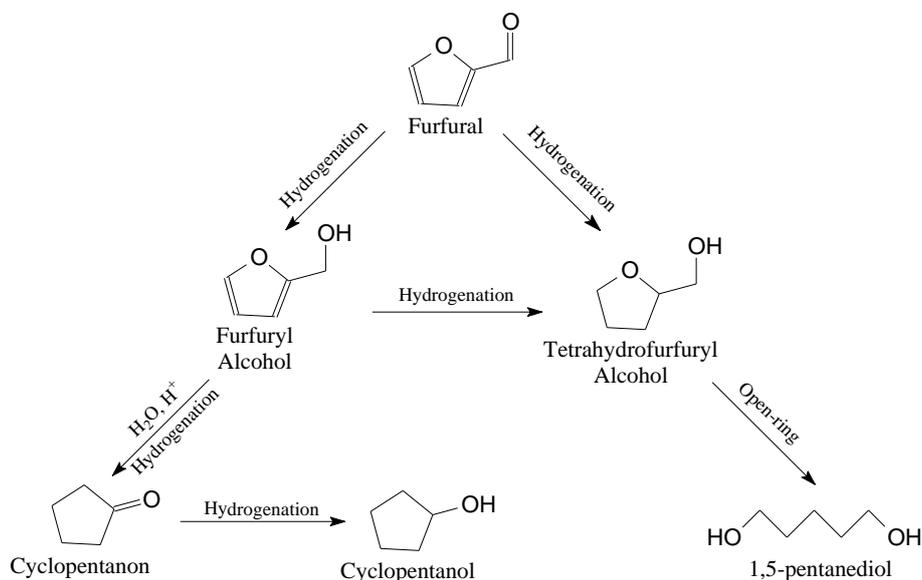


Рис. 1. Схема каталитического гидрирования фурфурола

В данной работе описаны свойства рутениевых катализаторов на основе сверхсшитого полистирола для жидкофазного гидрирования фурфурола в фурфуриловый спирт. Новизна работы заключается в исследовании структуры, морфологии и каталитических свойств наночастиц Ru<sup>0</sup> и RuO<sub>2</sub>, стабилизированных в матрице сверхсшитого полистирола. Установлено, что конверсия фурфурола и селективность к фурфуриловому спирту зависят от типа Ru в катализаторе. Данное исследование направлено на обеспечение высокой эффективности преобразования продуктов переработки биомассы в ценные химические вещества.

*Благодарности: исследование было выполнено при финансовой поддержке программы «УМНИК-2018» (50098) и РФФИ в рамках научного проекта № 19-38-90049.*

УДК: 548.5

Свешников Павел Александрович  
**АНИЗОТРОПИЯ ПРОЧНОСТНЫХ СВОЙСТВ  
МОНОКРИСТАЛЛОВ ГЕРМАНИЯ**

Руководитель: А.И. Иванова

Тверской государственный университет  
Кафедра прикладной физики

Монокристаллы германия имеют широкое применение в инфракрасной оптике, в качестве подложек для солнечных элементов, в производстве радиационно-стойких фотоэлектрических детекторов. Известно, что значения микротвердости кристаллического германия зависят от легирующей примеси, кристаллографического направления, плотности дислокаций. Германий является достаточно хрупким материалом, что делает трудной его механическую обработку [1-2].

В работе проведены экспериментальные исследования микротвердости кристаллов германия кристаллографических плоскостей (111), (110), (100). Показано, что наибольшая микротвердость наблюдается для плоскости (111). Изучено влияние плотности дислокаций на величину микротвердости германия. Испытания проводились методом Виккерса на приборе ПМТ-3 с алмазной четырехгранной пирамидкой с квадратным основанием при нагрузке 20г, в 50-ти точках в бездефектной области и вдоль зоны скопления дислокаций (малоугловой границе (МУГ)). Измерения микротвердости проводили на грани (111), размеры отпечатков определялись на растровом электронном микроскопе JEOL 6610LV (рис.1). Исходя из полученных значений, следует, что в области МУГ микротвердость снижается, в то время как в ее окрестности, где распределение дефектов носит равномерный характер, микротвердость значительно возрастает. Наблюдается снижение микротвердости при приближении к краю кристалла для всех радиусов, что обусловлено ростовыми напряжениями.

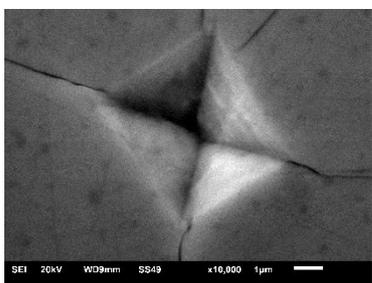


Рисунок: Электронно-микроскопическое изображение отпечатка алмазной пирамидки на плоскости (111)

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. О.И. Подкопаев, А.Ф. Шиманский, Т.О. Павлюк Выращивание монокристаллов германия с контролируемой структурой, содержанием примесей и оптическими свойствами. 2017. 152 с.
2. В.М. Глазов, В.Н. Вигдорович Микротвердость металлов и полупроводников. 1969. С. 248.

УДК: 662.756.3+544.478

Симанова Алёна Юрьевна

## ГИДРИРОВАНИЕ ЛАУРИНОВОЙ КИСЛОТЫ

Руководитель: А.А. Степачёва

Тверской государственный технический университет, г. Тверь  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Жирные спирты, содержащие в конечном положении гидроксильную группу, являются полупродуктами синтеза ПАВ, смазок, душистых веществ, лекарственных и косметических средств. Промышленное получение данных соединений заключается в окислении углеводородов нефти. Однако, современные тенденции в химической технологии ставят вопрос о поиске новых «зеленых» методов получения различных соединений. Одним из путей производства жирных спиртов является процесс гидрирования карбоксильной группы жирных кислот, содержащихся в растительных маслах и жирах. Такой подход полностью соответствует требованиям «зеленой химии», но сопряжен с рядом технологических трудностей, в частности, подбором катализатора, который будет селективно гидрировать карбоксильную группу, не затрагивая двойные связи углеводородного радикала.

Целью данной работы является исследование процесса гидрирования жирных кислот с целью получения жирных спиртов. Были изучены растворители, которые позволяют получить наибольшую селективность по лауриловому спирту.

Процесс жидкофазного гидрирования лауриновой кислоты проводили в неполярном растворителе (н-гексане) при следующих условиях: давление водорода 1.0 МПа, температура 200 °С. Анализ жидкой фазы был выполнен с помощью хроматографа GC-2010 и масс-спектрометра GCMS-QP2010S.

В качестве катализаторов был использован 2%-Pd/СПС. Использовались следующие растворители: гексан, толуол, изопропиловый спирт и вода. Сравнение исследуемых растворителей с точки зрения выхода целевого продукта - лаурилового спирта - показало, что гексан оказался наиболее селективен. При использовании полярных растворителей выход спирта оказался минимальным. Тoluол также показал большую селективность к альдегиду. Выход спирта при использовании гексана в качестве растворителя составил составляет 97,4%.

УДК: 661.1

Скачкова Дарья Михайловна

## **ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЛОИДНО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СМЕСЕЙ АНИОННЫХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ С АЛКИЛПОЛИГЛЮКОЗИДАМИ**

Руководитель: Н.В. Веролайнен, доцент, к.х.н.

Тверской государственный университет  
Кафедра органической и биоорганической химии

Алкилполиглюкозиды проявляют хорошие смачивающие, очищающие и моющие свойства, обладая при этом мягким дерматологическим действием, благодаря чему пригодны для использования в различных косметологических средствах.

Полученный в работе модифицированный алкилполиглюкозид с входящим в его состав алкилкарбоксилатом, обладающим свойством анионного поверхностно-активного вещества (ПАВ), сохраняет моющую способность и обеспечивает меньшую концентрацию ввода ПАВ в смеси.

Синтез осуществляли при температуре 90 °С, пониженном давлении и введении катализатора, который кроме сильной кислоты, содержал алкилкарбоновую кислоту, которая является анионным поверхностно-активным веществом (ПАВ), обладает термостабильностью, устойчивостью к окислительным агентам, кислотам и щелочам, проявляет превосходные эмульгирующие свойства. В качестве жирных спиртов были выбраны гексиловый и октиловый спирты. После завершения реакции катализатор нейтрализовали щелочью до pH 9-11, а избыток непрореагировавшего спирта удалили в тонкопленочном испарителе.

Строение алкилполиглюкозидов было подтверждено данными ИК-спектроскопии.

Для полученных соединений были определены поверхностное натяжение, пенообразующая способность их водных растворов, критическая концентрация мицеллообразования, краевого угла и работа смачивания поверхности.

### **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Прохорова Г.В. Коллоидно-химические свойства смесей анионных ПАВ с алкилполиглюкозидами дис. на соискание ученой степени канд. хим. наук. 2012. 116 с.
2. Холмберг К., Йенссон Б., Кронберг Б., Линдман Б. Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах/ Холмберг К.; под ред. Ямпольской Г.П. – М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2015. – 530 с.

УДК: 54.021; 54.056

Скобин Михаил Игоревич

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТИПОВОГО КОМПЛЕКСНОГО СОЕДИНЕНИЯ  
ЛАНТАНОИДА С ГЕПАРИНОМ В РАСТВОРЕ И ТВЕРДОМ ВИДЕ**

Руководитель: М.А. Феофанова

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Гепарин ( $\text{H}_3\text{Hep}$ ) является природным биополимером (рис. 1.), который широко применяется в медицине в качестве антикоагулянта. Предполагается, что комплексы лантаноидов с гепарином могут обладать повышенной фармакологической активностью вследствие синергизма компонентов.

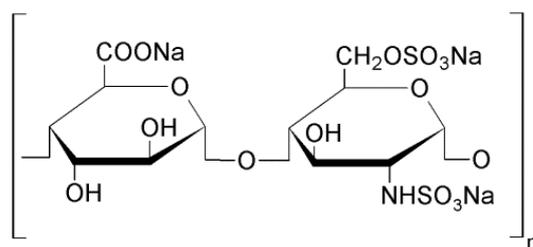


Рис. 1. Мономерное звено гепарина.

Исследование комплексообразования проводилось методом потенциометрического титрования. Для системы  $\text{SmCl}_3 - \text{Na}_3\text{Hep} - \text{H}_2\text{O}$  константы протонирования рассчитывали с помощью программы New DALSFEK (КСМ Soft, 2000), используя следующую модель равновесий:  $\text{H}^+ + \text{OH}^- \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}$ ;  $\text{Hep}^{3-} + \text{H}^+ \rightleftharpoons \text{NHep}^{2-}$ ;  $\text{Sm}^{3+} + \text{Hep}^{3-} \rightleftharpoons \text{SmHep}$ . В результате расчета было получено значение  $\lg\beta([\text{SmHep}]) = 4.28 \pm 0.02$ .

Синтез твердого комплекса осуществлялся смешением растворов хлорида самария и натриевой соли гепарина в эквивалентных количествах при температуре  $37^\circ\text{C}$  с последующими центрифугированием и высушиванием. ИК-спектры записывали на приборе Bruker Equinox 55 в диапазоне  $450 - 7500 \text{ см}^{-1}$  для образцов в виде таблеток с KBr. Результаты спектроскопического исследования комплекса представлены в таблице 1.

Таблица

Спектральные характеристики натриевой соли гепарина и комплекса.

Образец	$\nu(\text{O-H})$	$\nu(\text{C=O}), \text{ s}$	$\nu(\text{S=O}), \text{ as}$	$\nu(\text{S=O}), \text{ s}$	$\delta(\text{C-O-H})$
$\text{Na}_3\text{Hep}$	3443	1424	1235	1028	1128
$[\text{SmHep}]$	3419	1439	1226	1034	-

Данные ИК-спектроскопии позволяют предположить, что координация иона самария с гепарином происходит за счет взаимодействия металла с кислородными центрами функциональных групп гепарина. Методом ТГ установлено наличие трех молекул кристаллогидратной воды, что позволяет определить координационное число самария в комплексном соединении  $[\text{SmHep} \cdot 3\text{H}_2\text{O}]_n$ , как равное 8.

УДК: 541.49:581.1

Собирова Шахло Абдувалиевна

## **ФОРМИРОВАНИЕ УРОЖАЙНОСТИ КАПУСТЫ БЕЛОКОЧАННОЙ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ МЕДЬСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ**

Руководитель: О.В. Шилова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь  
Кафедра агрохимии и земледелия

С учетом дефицита меди в дерново-подзолистых почвах необходимо разрабатывать и применять способы увеличения ее содержания, поскольку при ее недостатке снижается урожайность сельскохозяйственных культур и ухудшается качество растениеводческой продукции. Одним из эффективных способов устранения недостатка меди является использование микроэлементов в форме хелатных комплексов с органическими комплексонами, такими как: этилендиаминдиантарная кислота (ЭДДЯК), иминодиантарная кислота (ИДЯК) и др. Целью проводимых исследований стало изучение совместного действия удобрений и медьсодержащих соединений на свойства дерново-подзолистой почвы и урожайность капусты белокочанной сорта «Слава».

Химический анализ используемого в опыте агрогумата калия показал, что он отличается высоким содержанием органического вещества (62,0%) и гумуса (36,0%). Количество азота и фосфора оказалось низким (0,8 и 0,3 % соответственно), а калия – высоким (8,3 %). Использование исследуемых медьсодержащих микроудобрений (сульфата меди и комплексоната меди) на фоне агрогумата привело к увеличению количества подвижных форм азота, фосфора и калия на протяжении всех сроков исследований по отношению к неудобренному контролю (в среднем на 6,2 – 23,8%).

Опрыскивание вегетирующих растений испытуемыми растворами вызвало изменение количества пигментов в листьях капусты. Наибольшим суммарным количеством хлорофиллов а и b отличался вариант с использованием Cu-ЭДДЯК на фоне агрогумата (117,6 мг/100 г листьев), а также с применением раствора CuSO<sub>4</sub> на удобренном фоне (69,6 мг/100 г листьев). Содержание каротиноидов незначительно увеличилось в листьях растений, обработанных комплексонатом меди на фоне агрогумата по отношению к остальным вариантам (в среднем на 0,5 – 2,4 мг/100 г листьев) и на 4,0 мг/100 листьев по сравнению с контролем. Кроме того, совместное применение агрогумата и медьсодержащего хелата позволило увеличить урожайность капусты на 55% по отношению к контролю и на 15 – 27,5% по сравнению с остальными вариантами опыта. Опрыскивание вегетирующих растений Cu-ЭДДЯК на фоне агрогумата калия вызвало заметное возрастание количества витамина С в кочанах (до 41 мг/100 г кочанов и прибавку к контролю – 25 мг/100 г кочанов соответственно).

УДК: 544.422+544.319

Соколова Юлия Александровна

**ТЕРМОДИНАМИКА И КИНЕТИКА НАБУХАНИЯ  
ФОТОПОЛИМЕРОВ ФИРМЫ JET  
В НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ ЖИДКОСТЯХ**

Руководитель: В.Ю. Конюхов

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, г. Москва  
Кафедра физической химии

В процессе производства флексографических печатных форм происходит взаимодействие между ними и различными компонентами печатных красок, в состав которых входят низкомолекулярные растворители. В ходе данного взаимодействия происходит поглощение полимером жидкости, приводящее к набуханию. Вследствие этого изменяются физико-механические свойства полимера, снижаются эластические свойства, и поэтому происходит ухудшение качества полиграфической печати. Таким образом, необходимы поиски низкомолекулярных растворителей, в которых данный полимер набухает, а к которым инертен.

С точки зрения кинетики были определены максимальная степень набухания (сильнее всего фотополимер набухал в бутилацетате) и константа скорости набухания (кинетика набухания идет по механизму реакции первого порядка) (таблица 1). С позиции рассмотрения термодинамики наибольшим термодинамическим сродством к фотополимерам обладает бутилацетат, что можно наблюдать, исходя из значений критерия Флори-Хаггинса и коэффициента диффузии (таблица 2).

Таблица 1

Кинетические данные набухания фотополимера в различных растворителях

Растворитель	Мах степень набухания $\alpha_{\infty}$ , %	Константа скорости набухания $k$ , час <sup>-1</sup>
Гептан	260,30	1,3328
Бутилацетат	265,31	0,4351
Этилацетат	96,80	0,3099

Таблица 2

Критерий Флори-Хаггинса и коэффициент диффузии для различных растворителей

Растворитель	$\chi$	$D \cdot 10^6$ , см <sup>2</sup> /с
Гептан	0,286	4,11
Бутилацетат	0,090	2,45
Этилацетат	0,685	6,86

УДК: 595.78

Соловьев Илья Николаевич

## **ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ МЕЛАНИНОВЫХ ПРЕПАРАТОВ НА ЖИЗНЕСПОСОБНОСТЬ ПОСЕВНОГО МАТЕРИАЛА**

Руководитель: Е.А. Прутенская, к.б.н., доцент

Тверской государственной технической университет  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

В настоящее время повышение урожайности сельскохозяйственных культур, в том числе ржи, является стратегически важной проблемой для многих государств, которой уделяется значительное внимание, как в научных исследованиях, так и в производственных условиях. Высококачественный посевной и посадочный материал в формировании урожая сельскохозяйственных культур занимает особое место. Известно, что от 60 до 80 % всех болезней в зависимости от культуры сохраняется на семенах, поэтому важным элементов процесса выращивания зерновых культур является предпосевная обработка семян.

Защитить проросток на первых этапах его развития от болезней наиболее эффективно, экономично и экологически безопасно обеспечивает предпосевное протравливание семян. В семенах происходят физико-химические, физиолого-биохимические процессы, морфологические изменения, приводящие к повышению проницаемости семенных покровов, усилению активности гидролитических и окислительно-восстановительных ферментов, ускорению темпа клеточного деления, активизации ростовых процессов в целом. Протравливание семян обеспечивает получение плотного и здорового стеблестоя – главного и решающего фактора запланированной урожайности.

Работа направлена на изучение влияния условий химической обработки на жизнеспособность семян злаковых, степень их зараженности грибной микрофлорой. Исследован стимулирующий эффект предпосевной обработки семян ржи растворами меланинов и подобран оптимальный режим протравливания. В результате происходит увеличение всхожести зерна на 4.2%.

Оценено прямое действие меланинов в оптимальном для обеспечения семян ржи режиме стерилизации, обеспечивающем освобождение семян от грибной микрофлоры: грибов класса зигомицетов (семейство мукооровые) и дейтеромицетов. Исследован стимулирующий эффект предпосевной обработки семян ржи на ряд показателей, характеризующих рост и развитие растений в условиях посадки в грунт. В частности, выявлен стимулирующий эффект роста корней, вегетативной части, степени развития листового аппарата.

УДК: 661.185.3

Стажок Татьяна Леонидовна

## ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ АМФОТЕРНЫХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Руководитель: Н.В. Веролайнен, доцент, к.х.н.

Тверской государственный университет  
Кафедра органической и биоорганической химии

Амфотерные поверхностно-активные вещества (ПАВ) отличаются мягким дерматологическим действием, обладают высокой биоразлагаемостью, а также повышенной моющей способностью [1]. Амфотерные ПАВ применяют в различных синергических смесях для повышения эффективности и улучшения их свойств, так, например, для повышения пенообразующей и эмульгирующей способности анионных поверхностно-активных веществ [2].

Целью данной работы являлось получение и изучение свойств амфотерных поверхностно-активных веществ на основе 2,2-диэтилэтанол-амина, что значительно сокращает материальные затраты на их производство и увеличивает способность к биоразложению.

Синтез осуществляли в две стадии. Этерификацию амина проводили декановой и додекановой кислотой при температуре 150-160°C, в качестве катализатора использовали цеолит. Полученные эфиры очищали путем вакуумной перегонки при давлении в 5 атм. Далее осуществляли нуклеофильное присоединение полученного эфира к акриловой кислоте. Реакция проводилась без доступа света при комнатной температуре.

Строение амфотерных ПАВ подтверждено качественными реакциями и данными ИК-спектроскопии. ИК-спектры N-декано-илоксиэтил-N,N-диэтиламмонийпропионата и N-додеканоилоксиэтил-N,N-диэтиламмонийпропионата содержат полосу валентных колебаний карбоксилат-аниона равную 1561 см<sup>-1</sup>.

Для полученных соединений были измерены удельная электропроводность, показатель преломления, поверхностное натяжение, определена пенообразующая способность их водных растворов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Файнгольд С.И., Кууск А.Э., Кийк Х.Э. Химия анионных и амфолитных азотсодержащих поверхностно-активных веществ / Файнгольд С.И.; под ред. Файнгольда С.И. – Таллин: «Валгус», 1984 – 289 с.
2. Холмберг К., Йенссон Б., Кронберг Б., Линдман Б. Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах/ Холмберг К.; под ред. Ямпольской Г.П. – М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2015. – 530 с.

УДК: 615.322

Стычинский Данил Максимович

**ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ АНТРОПОГЕННЫХ ФАКТОРОВ  
НА ОБРАЗОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА  
В ЭКСТРАКТАХ ХВОИ ЕЛИ ЕВРОПЕЙСКОЙ**

Руководитель: С.Д. Хижняк

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

В настоящее время прогнозирование и оценка экологической безопасности окружающей среды является одним из важнейших направлений необходимым для дальнейшего развития технологического прогресса. Благодаря исследованиям – биохимическим и морфологическим – установлено, что ель европейская может использоваться в роли биоиндикационного растения в городской среде, для изучения пагубных антропогенных воздействий в выбранной местности.

Цель данной работы – изучение влияния антропогенных факторов на химический состав хвои ели европейской методом УФ спектроскопии. Объектами исследования были образцы хвои ели, собранные в период с 1-10 октября, разделенные на 4 группы в зависимости от возраста иголок по годам. Сбор происходил в 4 местах г. Твери: вагоностроительный завод; полигон свалки твердых бытовых отходов; Тверская ТЭЦ-3; территория, прилегающая к трассе М10. Предполагаемые поллютанты в данной местности из-за большого трафика - монооксид углерода; альдегиды; диоксид серы; сернистый ангидрид и бензпирен.

Для исследований образцы иголок ели были высушены и измельчены, приготовлены водные и спиртовые экстракты. Кинетику формирования НЧС изучали на спектрометре «Evolution Array» фирмы «Thermo Scientific». Для этого к водным экстрактам образцов добавляли нитрат серебра ( $\text{AgNO}_3$ ) с концентрацией  $1 \cdot 10^{-2}$  М и через определенные промежутки времени регистрировали спектры. Установлено, что в водных растворах хвои ели европейской при добавлении нитрата серебра происходит образование наночастиц серебра (НЧС), которым в электронных спектрах соответствует широкая полоса поглощения с максимумом в диапазоне 440-450 нм. Обнаружено, что существует прямая связь между концентрацией НЧС, скоростью их образования и загрязненностью места сбора образцов. Следовательно, изучение химического состава хвои ели европейской и кинетики образования НЧС с помощью УФ спектроскопии может быть использовано для оценки влияния антропогенных факторов на состояние окружающей среды.

УДК: 547.821.3

Суратова Екатерина Сергеевна

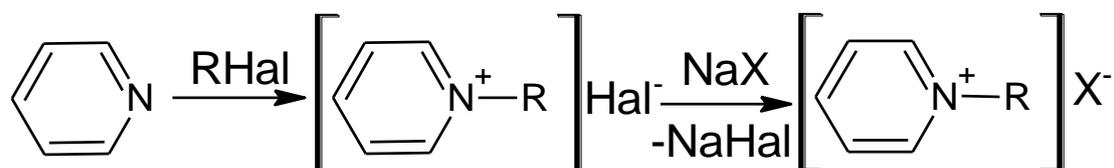
## СИНТЕЗ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ N-АЛКИЛПИРИДИНИЯ С НЕОРГАНИЧЕСКИМИ АНИОНАМИ

Руководитель: О.Е. Журавлев

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра органической химии

Ионные жидкости (ИЖ) представляют собой класс солей, являющихся жидкостями с низкими температурами плавления (ниже 100°C). В современной химии ионные жидкости весьма широко используются в качестве растворителей, катализаторов, электролитов для аккумуляторных батарей. Большой интерес представляет изучение влияния структуры органического катиона и природы аниона в составе ионной жидкости на их термические свойства.

Нами были синтезированы ИЖ с гексафторфосфат- и тетрафторборат-анионами и катионом N-алкилпиридиния с различной длиной алкильных заместителей (CH<sub>3</sub>, C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>, CH<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>, C<sub>8</sub>H<sub>17</sub>). Прекурсорами для получения гексафторфосфатов по реакции метатезиса выступали галогениды N-алкилпиридиния, которые в свою очередь были получены по реакции нуклеофильного замещения между пиридином и алкилгалогенидами. Схема реакций представлены ниже. Синтезированные соединения представляют собой жидкости или низкоплавкие твердые вещества белого или кремового цветов. Хорошо растворимы в полярных органических растворителях (спирт, ацетон, ацетонитрил), плохо растворимы в воде. Все синтезированные соединения охарактеризованы данными ИК-спектроскопии. Чистота подтверждена ТСХ. Определены основные физико-химические константы.



где R: CH<sub>3</sub>, C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>, CH<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>, C<sub>8</sub>H<sub>17</sub>.

Hal: I, Br.

X<sup>-</sup>: BF<sub>4</sub><sup>-</sup>, PF<sub>6</sub><sup>-</sup>.

УДК: 544.422

Суханова Анастасия Александровна

## ИССЛЕДОВАНИЕ РАСТВОРЕНИЯ КАЛЬЦИТА В КИСЛОЙ СРЕДЕ

Руководитель: В.И. Луцик

Тверской государственной технической университет, г. Тверь  
Кафедра химии и технологии полимеров

Отложения карбоната кальция на поверхности технологического оборудования при его эксплуатации в контакте с жесткой водой приводит к снижению теплопроводности и другим техническим проблемам. Такое оборудование периодически необходимо очищать, используя кислотные промывки. Чаще всего применяют растворы хлороводородной кислоты, содержащие добавку ингибитора коррозии стали – уротропина. Иногда для очистки применяют комплексоны, например, 1-гидроксиэтилиден-дифосфоновую кислоту (ОЭДФ).

Имеющиеся в литературе данные о кинетике процессов растворения карбоната кальция (кальцита) в присутствии названных кислот не являются исчерпывающими. Дополнительную информацию удастся получить путем построения и анализа многофакторных моделей процессов растворения при условии обеспечения равнодоступности реакционной поверхности в диффузионном отношении.

В работе исследовали кинетику растворения кальцита методом вращающегося диска. Содержания кальция в растворе определяли методом фотометрии пламени. В присутствии ОЭДФ наблюдалось резкое снижение интенсивности излучения вследствие образования в плазме фосфата кальция. В этом случае применяли спектрохимические буферы – связывающую фосфаты соль лантана и этилендиаминтетрауксусную кислоту (ЭДТА).

Для упрощения вида ожидаемой модели удельную скорость растворения ( $W$ , моль/дм<sup>2</sup>с) выразили в виде  $\lg W$ , а величины влияющих факторов ( $C_n$  кислоты, моль/дм<sup>3</sup>;  $T$ , К; частота вращения диска  $\omega$ , с<sup>-1</sup>) представляли в форме  $\lg C$ ,  $1/T$  и  $\lg \omega$ . Это позволило получить адекватную полиномиальную модель методом факторного планирования. Затем полином преобразовали в уравнения скорости, и провели его физико-химическую интерпретацию.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Соболев А.Е., Луцик В.И., Турковская О.В. Кинетика взаимодействия карбоната кальция с растворами оксиэтилидендифосфоновой кислоты // Известия вузов. Химия и хим. технология. – 2012. – № 1. – С. 42-46.

УДК: 546.26-162: 547-32

Сухов Петр Владимирович

## УГЛЕРОДНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ НА ОСНОВЕ СОЕДИНЕНИЯ СОИНТЕРКАЛИРОВАНИЯ НИТРАТА ГРАФИТА С МУРАВЬИНОЙ КИСЛОТОЙ

Руководители: Е.В. Ракша, М.В. Савоськин

Государственное учреждение

«Институт физико-органической химии и углехимии Л.М. Литвиненко», г. Донецк

Отдел супрамолекулярной химии

В работе представлены результаты синтеза и изучения свойств соединения соинтеркалирования нитрата графита (ССНГ) с муравьиной кислотой, а также использования его в качестве предшественника для генерирования дисперсий углеродных наночастиц.

Исследуемое ССНГ получали путем обработки графита марки ГТ-1 дымящей (98 %) азотной кислотой и последующей обработкой образующегося нитрата графита муравьиной кислотой по методике, приведенной в [1]. Методом рентгенофазового анализа установлено, что полученный продукт представляет собой смесь соединений II-й ( $\beta$ -форма) и IV-й ( $\alpha$ -форма) стадий интеркалирования. Дисперсии углеродных наночастиц получали путем расслоения свежеприготовленного образца ССНГ в этаноле при содействии ультразвука. Методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) показано, что дисперсии содержат смесь частиц, большинство которых представляют собой наноскроллы (рис. 1 - а - в), образование которых происходит уже в процессе расслоения частиц ССНГ (рис. 1 - б). Наноскроллы имеют длину от 0,2 до 1 мкм и характеризуются неравномерной формой и скручиванием, поскольку исходные плоскости содержат большое число дефектов поверхности.

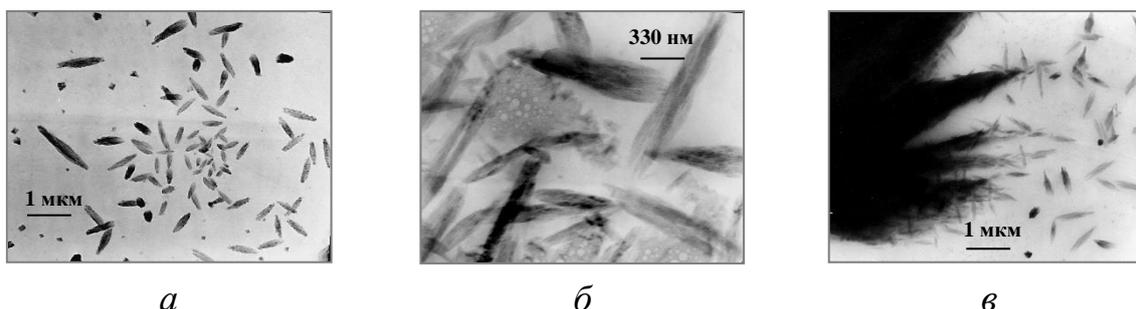


Рис. 1. Типичные ПЭМ изображения углеродных наночастиц полученных расслоением свежеприготовленного ССНГ в этаноле при содействии ультразвука (а - в)

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. А.А. Давыдова, Е.В. Ракша, В.А. Глазунова и др. // Ж. неорг. хим. - 2021. - Т. 66, № 3. - С. 336-343.

УДК: 614.37:661.185.1

Сушнев Сергей Петрович

## ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫЕ ВЕЩЕСТВА – ПОЛЬЗА ИЛИ ВРЕД?

Руководители: Г. Е. Бордина, Н.П. Лопина

Тверской государственной медицинской университет, г. Тверь  
Кафедра химии

Поверхностно-активные вещества – разнообразная группа химических веществ, известная широким использованием в моющих средствах. Цель исследования: изучить влияние ПАВ на организм.

Материалы и методы исследования: анализ современных литературных данных о химической структуре ПАВ, об использовании ПАВ в качестве моющих средств.

Результаты исследования: моющие средства для посуды представлены в магазинах в широчайшем ассортименте, но по составу они практически не отличаются. В них входят ПАВ, красители, консерванты, ароматизаторы. Сейчас в моющие средства добавляют ингредиенты, нейтрализующие воздействие химических компонентов на кожу рук, смягчая ее и оберегая от раздражения. Для защиты рук в дорогие составы добавляют аллантоин ( $C_4H_6N_4O_3$ ), а в более дешевые варианты – силикон ( $[R_2SiO]_n$ ) или глицерин ( $C_3H_8O_3$ ). Для усиления эффекта также вводят ферменты, они хорошо справляются с удалением нерастворимых белковых загрязнений, и бактерициды.

Водородный показатель определяет моющую способность средств для мытья посуды, их безопасность. Он характеризует, является средство нейтральным или обладает щелочной, кислотной реакцией, что сказывается на состоянии кожи рук. Оптимальным является pH, близкий к нейтральному значению – 7,0. Составы моющих средств базируются на синтетических составляющих. Один из самых агрессивных компонентов - ПАВ. Именно они удаляют жир и загрязнения с посуды, а заодно и «отчищают» кожу рук до шелушения. Воздействуя на кожу, ПАВ приводят к разрушению липидного барьера. После длительного контакта повышается проницаемость кожных покровов, появляется сухость. Самый большой вред для организма моющее средство наносит в результате плохого ополаскивания посуды, так как оно остаётся на тарелке. В таком случае вместе с едой в желудок попадают химикаты. Это может привести не только к пищевому отравлению, но и гастриту.

Выводы: большинство синтетических моющих средств содержат опасные вещества, оказывающие отрицательное влияние на организм.

УДК: 544.163; 544.134

Тимофеева Елизавета Владимировна

## МОНОЗАМЕЩЕННЫЕ БЕНЗОЛА В РАМКАХ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ АТОМОВ В МОЛЕКУЛАХ

Руководители: Н.П. Русакова, В.В. Туровцев

Тверской государственный университет

Кафедра физической химии

Методом V3LYP оптимизирована геометрия молекул тиофенола, хлорбензола, фторбензола и анилина ( $C_6H_5-R$ , где  $R = SH, Cl, F, NH_2$ ) (Рис.). В рамках «квантовой теории атомов в молекулах» вычислены интегральные электронные характеристики атомов (заряды и объемы), суммированные в

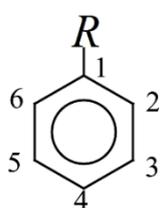


Рис. Общая структурная формула  $C_6H_5-R$ , где  $R = SH, Cl, F, NH_2$ ; показана нумерация атомов углерода ароматического кольца

параметры групп -  $q(R)$  и  $V(R)$  (Таблица). Групповые характеристики бензола и некоторых его производных ранее представлены в [1, 2].

Наибольшим зарядом среди рассмотренных  $SH, Cl, F, NH_2$  обладает группа  $SH$  (Таблица). Она проявляет электронодонорные свойства и отдает долю своей электронной плотности ( $\rho(r)$ ) в соседний атомный бассейн атома 1С ароматического кольца. Это приводит к отрицательным значениям зарядов  $q(1C)$  и  $q(C_6H_5)$  и увеличению  $V(1C)$  и  $V(C_6H_5)$  в  $C_6H_5-SH$  по отношению к аналогичным параметрам других молекул. Заместители  $Cl, F$  и  $NH_2$  выступают акцепторами  $\rho(r)$ , стягивая  $\rho(r)$  с ароматического кольца в свои атомные бассейны и понижая  $q(R)$ .

Таблица

Заряды ( $q(R)$ ) и объемы ( $V(R)$ ) групп в  $C_6H_5-R$ , где  $R = SH, Cl, F, NH_2$ 

1C	2CH	3CH	4CH	5CH	6CH	$C_6H_5$	$R$	$R$
$q(R)$ , в а.е								
-0,138	0,022	0,015	0,006	0,012	0,019	-0,065	0,065	SH
0,071	0,060	0,020	0,014	0,020	0,060	0,245	-0,245	Cl
0,505	0,055	0,022	0,012	0,022	0,055	0,670	-0,670	F
0,388	-0,018	0,003	-0,009	0,003	-0,018	0,350	-0,350	$NH_2$
$V(R)$ , Å <sup>3</sup>								
10,9	19,5	19,7	19,9	19,7	19,5	109,0	38,2	SH
10,3	19,2	19,6	19,8	19,6	19,2	107,8	32,4	Cl
9,2	19,5	19,6	19,9	19,6	19,5	107,2	16,5	F
9,1	20,0	19,7	20,2	19,7	20,0	108,6	27,1	$NH_2$

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Русакова Н.П., Завьялова А.Г., Туровцев В.В., Третьяков С.А., Федина Ю.А., Орлов Ю.Д. // Вестник ТвГУ. Серия: Химия. 2019. № 4 (38). С. 14-25.
2. Русакова Н.П., Курочкин Г.А., Софронова Ю.И., Туровцев В.В. // Вестник ТвГУ. Серия: Химия. 2020. № 2 (40). С. 53-61.

УДК: 544.6.076.32

Туманов Григорий Алексеевич

## ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАНЕСЕННЫХ НА ЭЛЕКТРОДЫ ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ ФЕРМЕНТОВ

Руководитель: Н.В. Лакина

Тверской государственный технический университет, г. Тверь,  
Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации

Анализ зарубежных источников литературы показывает, что наиболее часто в конструкции рабочих электродов биотопливных элементов применяются окислительно-восстановительные ферменты, иммобилизованные в электронпроводящие матрицы, такие как глюкозооксидаза (GOx), пероксидазу (HRP) [1, 2].

В данной работе исследовалась электропроводящая способность полимерной композиции на основе полианилина (ПАН/Хит/Glu) с включенным в неё комплексом окислительно-восстановительных ферментов GOx:HRP. Электрод был сконструирован путем сжатия в корпусе из оргстекла смеси ПАН/Хит/Glu/GOx:HRP с образованием биоанода. Измерения проводились с помощью потенциостата-гальваностата Р-40Х. Полученные данные представлены на рисунке 1.

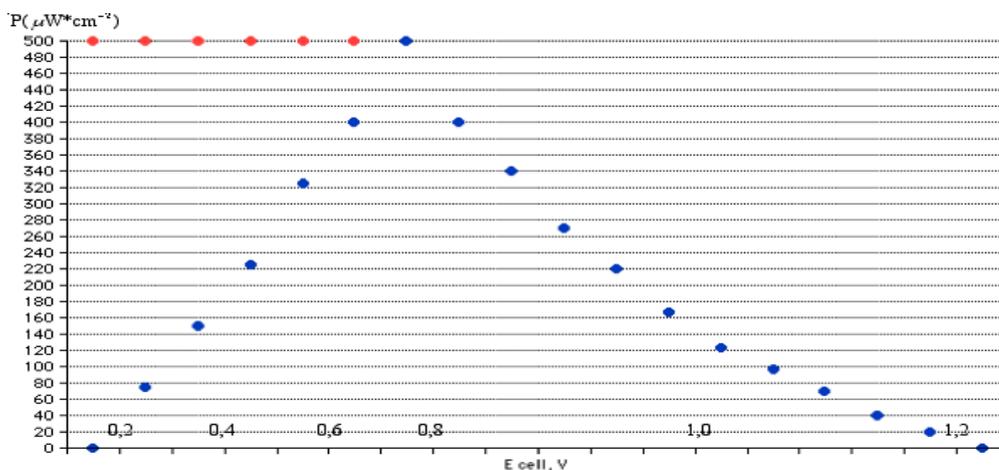


Рис. 1. Характеристика производительности комплекса GOx:HRP  
глюкозного биотопливного элемента

Включение биоанода в глюкозный биотопливный элемент обеспечивает высокую плотность тока  $630 \text{ мкА} \times \text{см}^{-2}$  и максимальную плотность мощности  $530 \text{ мкВт} / \text{см}^2$  при  $0,85 \text{ В}$ , что делает перспективным применение каскада ферментов в его конструкции.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №19-08-00186.*

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Elouarzaki, K. et al. Freestanding HRP–GOx redox bucky paper as an oxygen reducing biocathode for biofuel cell applications. Energy Environ. Sci. 8, 2069–2074 (2015).
2. Mano, N. & Poulpiquet, Ade O<sub>2</sub> Reduction in enzymatic biofuel cells. Chem. Rev. 118, 2392–2468 (2017).

УДК: 544.4.032.7

Тупикина Елена Павловна

**ВЛИЯНИЕ ВЫБОРА РАСТВОРИТЕЛЯ  
НА ПРОТЕКАНИЕ РЕАКЦИИ СОНОГАШИРА,  
КАТАЛИЗИРУЕМОЙ ПАЛЛАДИЕМ**

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

Тверской государственный технический университет, г. Тверь  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Реакция Соногаширы – это кросс-сочетание винил- и арилгалагенидов с образованием С-С связи. Данная реакция была открыта в 1975 г., при этом в качестве катализатора использовался гомогенный палладиевый комплекс ( $\text{PdCl}_2(\text{PPh}_3)_2$ ), а в качестве сокатализатора –  $\text{CuI}$ . Важно отметить, что применение  $\text{CuI}$  способствует образованию побочных продуктов, поэтому актуальной задачей является разработка методики проведения реакции Соногашира без использования сокатализаторов.

В данной работе исследовалась возможность проведения реакции Соногашира между фенилацетиленом и 4-йоданизолом в присутствии палладиевого катализатора на основе сверхсшитого полистирола (2.5%-Pd/MN270). Реакция велась в периодическом режиме в инертной атмосфере (азот) при скорости перемешивания 900 об/мин в присутствии ацетата натрия и тетрабутиламонния бромида. В ходе экспериментов были использованы такие растворители как диметилсульфоксид (ДМСО), этанол, вода, а также смесь этанола и воды (5:1). При этом температура была выбрана, исходя из природы растворителя: в случае ДМСО и воды – 90°C, тогда как в случае этанола или его смеси с водой – 70°C.

Было обнаружено, что применение ДМСО позволяет провести реакцию до конца: уже спустя 60 минут после внесения фенилацетилена образовался продукт реакции – 1-метокси-4-(фенилэтинил)бензол. Использование дистиллированной воды оказалось неэффективным, так как приводило к агрегации катализатора. В случае этанола и его смеси с водой реакция протекала значительно медленнее и требовала добавления в реакционную смесь триэтиламина.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда  
(проект №20-19-00386).*

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Sonogashira, K., Tohda, Y., Nagihara, N. Convenient synthesis of acetylenes: catalytic substitutions of acetylenic hydrogen with bromoalkenes, iodoarenes and bromopyridines. *Tetrahedron Letters*. 1975. V. 16. P. 4467–4470.

УДК: 537.226.4

Феногенова Владилина Владиславовна

**ДИСПЕРСИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК  
МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР  
НИТРИД АЛЮМИНИЯ/НИТРИД АЛЮМИНИЯ ГАЛЛИЯ**

Руководители: А.В. Солнышкин, О.Н. Сергеева

Тверской государственный университет  
Кафедра физики конденсированного состояния

В работах проведены исследования монокристаллических образцов, содержащих слои AlN/AlGaN. Образцы выращены методом хлор-гидридной эпитаксии (ХГЭ), позволяющим получать монокристаллические слои нитридов. Для получения монокристаллов использовались кремниевые подложки с буферными слоями карбида кремния толщиной 100 нм. После выращивания монокристаллов подложка удаляется. Ориентация монокристаллических пластин соответствовала направлению [0001], совпадающему с направлением спонтанной поляризации. Для сравнительных исследований методом ХГЭ так же были получены монокристаллические слои нитрида алюминия аналогичной ориентации.

Исследования диэлектрических характеристик в переменном электрическом поле проводились с помощью измерителя иммитанса E7-20. Амплитуда тестового измерительного сигнала составляла 1 В. Зависимости диэлектрической проницаемости и тангенса угла диэлектрических потерь получены в диапазоне частот 25 – 10<sup>6</sup> Гц. Определены вольт-фарадные (С - V) характеристики исследуемых структур в диапазоне от -40 до +40 В.

Диэлектрические параметры для исследуемых структур в значительной степени зависят от частоты измерительного сигнала. Диэлектрическая проницаемость достаточно монотонно падает от 60 (при 25 Гц) до 20 (при 10<sup>6</sup> Гц). Необходимо отметить, что тангенс угла диэлектрических потерь имеет малые значения во всем исследуемом частотном интервале, но при этом он значительно уменьшается с частотой от 0,02 (в низкочастотном диапазоне) до 0,003 (в высокочастотной области). Монокристаллические пластины AlN, полученные ХГЭ, характеризуются менее выраженной дисперсией диэлектрических свойств: диэлектрическая проницаемость в исследуемом диапазоне частот слабо уменьшается от 27 до 20, тогда как тангенс угла диэлектрических потерь практически не зависит от частоты и составляет 0,0018. Таким образом, полученные методом ХГЭ монокристаллические образцы характеризуются диэлектрическими свойствами, близкими к свойствам монокристаллов AlN и GaN, которые полученные традиционными методами выращивания кристаллов.

УДК: 544.732.2

Фомина Юлия Сергеевна

**АДСОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА  
ПИГМЕНТОВ ЦВЕТНОЙ ПЕЧАТИ**

Руководитель: В.Ю. Конюхов

Российский химико-технологический университет, г. Москва

Кафедра физической химии

Важным потребителем пигментов является печатная краска – основной материал в полиграфическом производстве. Знание свойств поверхности используемого пигмента позволяет предсказать характер взаимодействия пигмента и связующего, что дает возможность стабилизировать дисперсную систему посредством добавок (например, ПАВ), модификацией пигмента и т.д. Количественной оценкой свойств поверхности пигмента является коэффициент гидрофильности. Для экспериментального определения данного параметра удобно использовать метод обращенной газовой хроматографии [1]. На основании данных зависимости приведенного удельного объема удерживания от температуры в линейных координатах  $\ln V = f(1/T)$  были получены тангенсы угла наклона прямой для всех исследованных пигментов, из которых получены значения дифференциально-молярных изостерических теплот адсорбции  $q_{st}$  для воды и гептана.

Таблица

Дифференциально-молярные изостерические теплоты адсорбции при максимальной концентрации адсорбата в газовой фазе.

Пигмент	$q_{st}$ (вода), кДж/моль	$q_{st}$ (гептан), кДж/моль	Коэффициент гидрофильности
Фталоцианат меди	- 29.1	- 25.9	1.12
Хинакридон	- 31.5	- 32.4	0.97
Флавантрон	- 33.9	- 31.4	1.08

Для всех пигментов были рассчитаны коэффициенты гидрофильности  $k$  – отношение дифференциально-молярных изостерических теплот адсорбции воды и гептана (таблица 1). Соответственно, если  $k > 1$ , то поверхность можно считать гидрофильной, если  $k < 1$  – гидрофобной. Все перечисленные пигменты, кроме хинакридона, обладают гидрофильными свойствами поверхности.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Конюхов В.Ю. Хроматография. Санкт-Петербург: Лань, 2012. 222 с.

УДК: 635.21 + 631.8

Ханмамедов Гочмурад Сарыханович

## **ПРИМЕНЕНИЕ АГРОГУМАТА КАЛИЯ ПРИ ВОЗДЕЛЫВАНИИ КАРТОФЕЛЯ**

Руководитель: О.В. Шилова

Тверская государственная сельскохозяйственная академия, г. Тверь  
Кафедра агрохимии и земледелия

В условиях Тверской области применение удобрений необходимо ввиду низкого естественного плодородия дерново-подзолистых почв. Применение гуминовых удобрений существенно улучшает целый ряд агрофизических, агрохимических и биологических свойств почвы. Использование указанных удобрений с уменьшенной дозой минеральных удобрений, позволяет получать чистую и экологически безопасную растениеводческую продукцию. Поэтому целью проводимых полевых исследований стало сравнение эффективности удобрений на свойства почвы и урожайность картофеля сорта «Ред Скарлет».

Агрогумат калия получен путем глубокой физико-химической переработки торфа. При анализе химического состава агрогумата калия установлено, что среди элементов питания преобладало количество калия (5,9%). Содержание общего азота составило 2,1%, а количество фосфора оказалось самым низким – 0,95 %. Агрогумат обладал слабощелочной реакцией (8,2) и содержал высокое количество органического вещества (67,5%).

Во все периоды исследований максимальным количеством нитратного азота, подвижного фосфора и обменного калия отличалась почва, удобренная минеральными удобрениями и агрогуматом в дозе 3 т/га с  $N_{28}P_{13}K_{78}$  (в среднем на 6,5 – 18,5% больше по отношению к остальным вариантам). При этом разница между органоминеральным фоном и минеральным фоном составляла в среднем 0,4 – 0,9%.

Максимальная урожайность клубней картофеля (223 ц/га) и прибавка к контролю (33 ц/га) получены на варианте с применением минеральных удобрений. При использовании минеральных удобрений с агрогуматом в дозе 1,5 т/га урожайность составила 221 ц/га, что на 2 ц/га меньше по сравнению с дозой 3 т/га. Наибольшим содержанием крахмала отличались клубни, выращенные на минеральном фоне (13,9%), а минимальным среди удобренных вариантов – клубни варианта с чистым агрогуматом (10,1%). Разница между значениями крахмала на вариантах с разными дозами агрогумата (3 т/га и 1,5 т/га) в сочетании с минеральными удобрениями составила 0,7%. Максимальное количество аскорбиновой кислоты выявлено в клубнях, выращенных на варианте с агрогуматом в дозе 3 т/га и  $N_{28}P_{13}K_{78}$  (14,1 мг/100 г клубней). Содержание витамина С в клубнях варианта с использованием агрогумата в чистом виде незначительно уступало варианту с минеральными удобрениями (на 0,7 мг/100 г клубней).

УДК: 537.226

Хлопкин Александр Евгеньевич

**ГИСТЕРЕЗИСНЫЕ ЯВЛЕНИЯ  
В КАЛИЙ- И НАТРИЙСОДЕРЖАЩИХ КРИСТАЛЛАХ  
ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА**

Руководитель: Н.Н. Большакова

Тверской государственный университет.  
Кафедра физики конденсированного состояния

Настоящая работа поставлена с целью получения информации о диэлектрических свойствах и процессах переключения калий- и натрийсодержащих кристаллов триглицинсульфата (ТГС:  $\text{Na}^+:\text{K}^+$ ). Исследования проведены на образцах монокристаллов  $\text{Na}^+:\text{K}^+$ , содержащих 3 мол% примесей в растворе. Процессы переключения образцов исследованы с помощью схемы Сойера-Тауэра на частоте 50 Гц, емкость измерена компенсационным методом. Кристаллы подвергались высокотемпературному отжигу ( $\sim 100^\circ\text{C}$ ) в течение шести часов с последующим медленным охлаждением.

Установлено, что для монокристаллов  $\text{Na}^+:\text{K}^+$  петли диэлектрического гистерезиса практически не содержат искажений. Кристаллы обладают униполярностью и внутренними полями смещения. Величины относительной диэлектрической проницаемости для исследованных составов до и после отжига различаются на 20%, что существенно выше погрешности измерения этих величин (5%). Значения эффективной диэлектрической проницаемости для легированных образцов выше аналогичных для беспримесного кристалла. До и после отжига они различаются на 20% для чистых кристаллов ТГС и на (4-8)% для образцов ТГС:  $\text{Na}^+:\text{K}^+$ , что находится в пределах погрешности эксперимента (10%). Измерения величин переключаемой поляризации колеблются от 3% до 9%, что находится в пределах погрешности эксперимента ( $\sim 10\%$ ). После отжига значения коэффициента униполярности для исследованных составов имеют тенденцию к увеличению, а тангенса угла диэлектрических потерь – к уменьшению.

Доменная структура кристаллов ТГС:  $\text{Na}^+:\text{K}^+$  состоит из матрицы основного домена, в котором расположено незначительное количество линзовидных доменов, занимающих порядка 4% объема образца и имеющих противоположное направление вектора поляризации  $P_s$ . Полученные результаты можно объяснить увеличением дефектности кристаллов ТГС за счет введенных примесей, которые стабилизируют доменную структуру и затрудняют процессы их реполяризации.

УДК: 544.147.3

Цветкова Виктория Александровна

## ОСОБЕННОСТИ САМООРГАНИЗАЦИИ В СИСТЕМАХ L-ЦИСТЕИН/AgNO<sub>2</sub> И N-АЦЕТИЛ-L-ЦИСТЕИН/AgNO<sub>2</sub>

Руководители: Д.В. Вишневецкий, Т.В. Потапенкова

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра физической химии

Исследования в области молекулярной самосборки продолжают привлекать внимание ученых со всего мира. Это связано с многообразием возможных структур, которые формируются в ходе самоорганизации, а соответственно и их различными конечными свойствами. Недавно коллектив авторов из ТвГУ открыл новейшую супрамолекулярную гель-систему, содержащую наночастицы серебра (НЧС), используя один из подходов зеленых нанотехнологий [1]. Были получены первые результаты и выдвинут возможный механизм самоорганизации, а также показаны некоторые биоактивные свойства гелевой композиции.

В настоящей работе объектами изучения стали системы, полученные смешением водных растворов низкой концентрации на основе серосодержащих аминокислот – L-цистеина (ЦИС) и AgNO<sub>2</sub>, а также N-ацетил-L-цистеина (НАЦ) и AgNO<sub>2</sub>. В ходе эксперимента варьировались концентрации исходных компонентов и их соотношение. Синтезированные системы были исследованы методами УФ-спектроскопии, динамического рассеяния света, измерения дзета-потенциала и проводимости, сканирующей электронной микроскопии и элементного анализа, просвечивающей электронной микроскопии и рентгено-дифракционного анализа.

Установлено, что химическая природа аминокислоты существенно влияет на возможность получения одновременно тиксотропного геля и НЧС в его матрице. Это характерно для системы с ЦИС и не характерно для НАЦ. Изменение концентрации исходных компонентов и их соотношения позволяет контролировать конечные важные характеристики системы: вязкость, стабильность, дисперсность, форма и размеры НЧС, величина заряда, концентрация НЧС и индекс полидисперсности.

*Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования  
Тверского государственного университета.*

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. D.V. Vishnevetskii, A.R. Mekhtiev, T.V. Perevozova, D.V. Averkin, A.I. Ivanova, S.D. Khizhnyak and P.M. Pakhomov. L-cysteine/AgNO<sub>2</sub> low molecular weight gelators: self-assembly and suppression of MCF-7 breast cancer cells. // Soft Matter. 2020. 16 9669-9673. doi.org/10.1039/D0SM01431A.

УДК: 547.821.3

Челидзе Екатерина Шалвовна

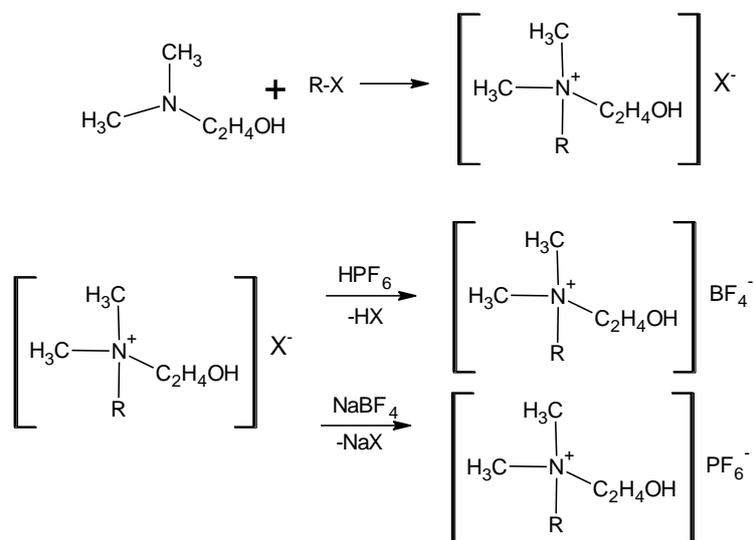
## СИНТЕЗ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ 2-(ДИМЕТИЛАМИНО) ЭТАНОЛА С НЕОРГАНИЧЕСКИМИ АНИОНАМИ

Руководитель: О.Е. Журавлев

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра органической химии

Гексафторфосфаты и тетрафторбораты четвертичного аммония, диалкилимидазолия и N-алкилпиридиния полученные еще в начале 90-х годов XX века принадлежат к классу гидрофобных низкотемпературных ионных жидкостей (ИЖ). Устойчивость и химическая инертность этих органических соединений наряду с коммерческой доступностью в значительной степени способствовала развитию исследований в области синтеза, катализа и др. областях органической химии. Гидрофобность гексафторфосфатов и тетрафторборатов является значительным преимуществом при их применении в качестве ионных жидкостей.

Поэтому целью данной работы был синтез гексафторфосфатов и тетрафторборатов на основе солей 2-(диметиламино)этанол. Ионные жидкости были получены из галогенидов 2-(алкилдиметиламино)этанол, путем метатезиса галогенид-аниона на  $\text{PF}_6^-$  и  $\text{BF}_4^-$  соответственно. Исходные галогениды были получены в результате реакций кватернизации 2-(диметиламино)этанол различными алкилгалогенидами (схема):

где,  $\text{R}=\text{CH}_3, \text{C}_4\text{H}_9, \text{C}_8\text{H}_{17}, \text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$   $\text{X}=\text{Br}^-, \text{I}^-$ 

Синтезированные соединения представляют собой жидкости или низкоплавкие твердые вещества белого или кремового цветов. Хорошо растворимы в полярных органических растворителях, плохо растворимы в воде. Структура подтверждена данными ИК-спектроскопии.

УДК: 543.544; 615.33

Чердакова Елена Николаевна

**ПРИМЕНЕНИЕ ПЛАНАРНЫХ ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКИХ  
СЕНСОРОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЦЕФУРОКСИМА  
В ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТАХ  
РАЗЛИЧНЫХ ПРОИЗВОДИТЕЛЕЙ**

Руководитель: Е.Г. Кулапина

Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, г. Саратов  
Кафедра аналитической химии и химической экологии

Цефуроксим – кислотный антибиотик II поколения цефалоспоринового ряда. Целью настоящей работы является применение планарных потенциометрических сенсоров для определения цефуроксима в лекарственных препаратах различных производителей.

В качестве электродноактивного соединения в углеродосодержащих чернилах в работе использовали ионные ассоциаты тетрадециламмония с комплексными соединениями серебро(I) – цефуроксим. Оптимальное соотношение компонентов углеродсодержащих чернил: 30-32% порошка углерода, 16-18% ПВХ, 48-50% пластификатора, 2-5% ЭАВ [1].

Исследовали электроаналитические свойства сенсоров, чувствительных к антибиотикам: цефуроксим ( $\alpha \pm \Delta\alpha = 50 \pm 1$  мВ/рС,  $C_{\min} = 5 \cdot 10^{-5}$  М,  $\tau = 20-30$  с), цефурус ( $\alpha \pm \Delta\alpha = 52 \pm 1$  мВ/рС,  $C_{\min} = 6,3 \cdot 10^{-5}$  М,  $\tau = 20-25$  с), цефурозин ( $\alpha \pm \Delta\alpha = 48 \pm 1$  мВ/рС,  $C_{\min} = 6,8 \cdot 10^{-5}$  М,  $\tau = 20-30$  с). Интервал линейности электродных функций для всех препаратов одинаков ( $1 \cdot 10^{-2} - 1 \cdot 10^{-4}$  М), срок службы 1 мес.

Таблица

Определение цефуроксима в растворах различных производителей (n=3, p=0,95)

Производитель	Введено, мг/10 мл	Найдено, мг/10 мл	Sr	D, %
Цефуроксим ОАО «Красфарма», г. Красноярск	0,85	0,74±0,02	0,01	12,9
Цефурус ОАО «Синтез», г. Курган	0,85	0,81±0,03	0,01	4,7
Цефурозин «Протекх Биосистемс», Индия	0,85	0,78±0,03	0,02	8,2

В растворе цефуруса (производитель: Синтез ОАО г. Курган) сенсоры генерируют аналитический сигнал лучше, чем в растворах препаратов других производителей. Наблюдается уменьшение времени отклика, угол наклона электродных функций приближается к теоретическому в соответствии с уравнением Нернста для однозарядных ионов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. E.G. Kulapina, M.S. Tyutlikova, O.I. Kulapina and A.E. Dubasova, J. Anal. Chem., 2019, vol. 74 no 1, S52-S58.

УДК: 66.094.25

Шарапова Мария Дмитриевна

## ГИДРИРОВАНИЕ НИТРОБЕНЗОЛА В МЯГКИХ УСЛОВИЯХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КАТАЛИЗАТОРА Pd/MN100

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

Тверской государственный технический университет, г. Тверь  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Гидрирование нитросоединений – важный производственный процесс получения аминов. Амины являются ценными химическими промежуточными соединениями, широко используются в производстве фармацевтических препаратов, полимеров, пестицидов, взрывчатых веществ, волокон, красителей и косметики [1]. Восстановление нитрогруппы (нитробензола (НБ), в частности) происходит по известному пути реакции Хабер-Босха, при котором нитрогруппа восстанавливается до амина вместе с образованием продуктов конденсации между нитрозобензолом и гидроксифениламином [2].

В рамках данной работы исследовано поведение палладиевого катализатора на основе сверхсшитого полистирола марки MN100 в реакции гидрирования НБ. Данный катализатор был синтезирован методом пропитки носителя раствором ацетата палладия в тетрагидрофуране. Гидрирование НБ с применением катализатора Pd/MN100 проводилось в среде этанола в присутствии борогидрида натрия ( $\text{NaBH}_4$ ) в качестве восстановителя. Целевым продуктом реакции являлся анилин. В ходе реакции проводили отбор проб катализата на анализ. Анализ осуществлялся методом газовой хромато-масс-спектрометрии с применением газового хромато-масс-спектрометра GCMS-QP2010S (SHIMADZU, Япония).

При молярном соотношении НБ и  $\text{NaBH}_4$ , равном 1 : 3, и температуре  $35^\circ\text{C}$  в присутствии Pd/MN100 была достигнута конверсия НБ 96% за 5 минут реакции. При этом селективность по отношению к анилину достигла 91% (было выявлено два побочных продукта реакции – азобензол и азоксибензол). В дальнейшем планируется изучение влияния условий проведения реакции гидрирования на скорость превращения НБ с использованием катализатора Pd/MN100.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Vogt P.F. [et.al.] / Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. 2000. V.2. P.699.
2. Pietrobon L. [et.al.] / Applied Catalysis A, General. 2020. V.598. P.175.

УДК: 543.242

Шачнева Кристина Сергеевна

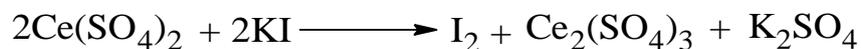
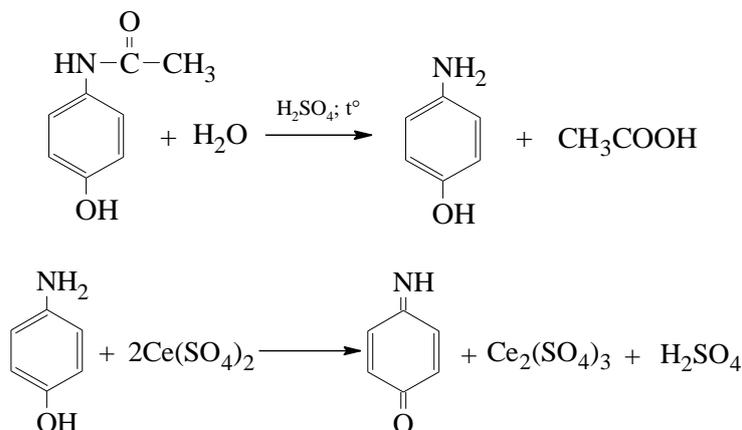
## ОБРАТНОЕ ЦЕРИМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ П-АЦЕТАМИНОФЕНА В ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВАХ

Руководитель: Н.В. Баранова

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра неорганической и аналитической химии

Контроль качества лекарственных препаратов – одна из главных проблем современного здравоохранения России. Несоответствие заявленной и фактической дозировки активного вещества в выпускаемых формах, а также фальсифицированные препараты могут повлечь за собой серьезные осложнения при лечении различных болезней.

В качестве объекта исследования были выбраны препараты, которые содержат п-ацетаминофен в качестве активного вещества. Количественное определение п-ацетаминофена проводили обратным цериметрическим методом, который основан на предварительном кислотном гидролизе п-ацетаминофенола и последующем окислении п-аминофенола избытком 0,1 н раствора  $\text{Ce}(\text{SO}_4)_2$  [1]. Процесс протекает по схеме:



Количество активного вещества в одной таблетке получено из расчета, что на 1 мл 0,098 н раствора  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$  приходится 7,4 мг парацетамола. В результате проведенного анализа можно сделать вывод о подлинности этих препаратов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Государственная фармакопея Российской Федерации. XIII изд. Т. 1-3. М.; 2015.

УДК: 547.821.3

Шекина Ксения Дмитриевна

**ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ  
РАСТВОРОВ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ  
ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ N-АЛКИЛ-2-МЕТИЛПИРИДИНА**

Руководитель: О.Е. Журавлёв

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра органической химии

В настоящее время ионные жидкости (ИЖ) находят широкое применение в качестве экстрагентов, растворителей, в синтезе электропроводящих полимеров, в частности, ионные жидкости в смеси с молекулярными растворителями находят применение в качестве каталитических сред, электролитов для батарей и суперконденсаторов.

В настоящей работе в качестве объектов исследования были выбраны ИЖ с катионом N-алкил-2-метилпиридиния и различными неорганическими анионами ( $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{BF}_4^-$ ,  $\text{PF}_6^-$ ). Длина алкильного заместителя варьировалась от  $\text{C}_1$  до  $\text{C}_8$ . Для изучения поведения ИЖ в растворах нами проведено кондуктометрическое исследование растворов ИЖ. В качестве растворителя был выбран ацетонитрил. На основе кондуктометрических измерений, были построены зависимости эквивалентной электропроводности (ЭП) от концентрации. Были рассчитаны константы ионной ассоциации ( $K_a$ ), предельные молярные ЭП ( $\lambda_0$ ), а также энергия Гиббса ассоциации  $\Delta G$ . Для расчета этих параметров по кондуктометрическим данным для коэффициентов активности и электропроводности использовалось второе приближение теории Дебая-Хюккеля и уравнение Ли-Уитона.

Установлено, что зависимость ЭП растворов ИЖ в ацетонитриле от концентрации схожа с таковой для водных растворов сильных электролитов. Значения констант ассоциации ИЖ в ацетонитриле зависят от размера и природы, как катиона, так и аниона в ИЖ. Наиболее ассоциированной ИЖ из изученных нами является хлорид N-бензил-2-метилпиридиния. Галогениды четвертичного N-алкил-2-метилпиридиния обладают наибольшими значениями эквивалентной электропроводности по сравнению с гексафторфосфатами и тетрафторборатами.

УДК: 548.57

Шишков Григорий Сергеевич

## ЗАВИСИМОСТЬ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КЕРАМИКИ ТИТАНАТА БАРИЯ И КОМПОЗИТА ТИТАНАТ БАРИЯ – ФЕРРИТ БАРИЯ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ СПЕКАНИЯ

Руководитель: О.В. Малышкина

Тверской государственный университет  
Кафедра прикладной физики

В работе проведено сравнение структуры и диэлектрических свойств образцов керамики титаната бария, спеченных при температурах 1100, 1150, 1200, 1250 и 1350 °С. Анализ структуры образцов подтвердил зависимость диэлектрических свойств керамики титаната бария от размера зёрен и, как следствие, от температуры спекания. На основании проведенных исследований выбран оптимальный режим получения образцов композита титанат бария (80 объемных %) – феррит бария (20 объемных %), спеченных при температурах 1150, 1200 и 1250 °С.

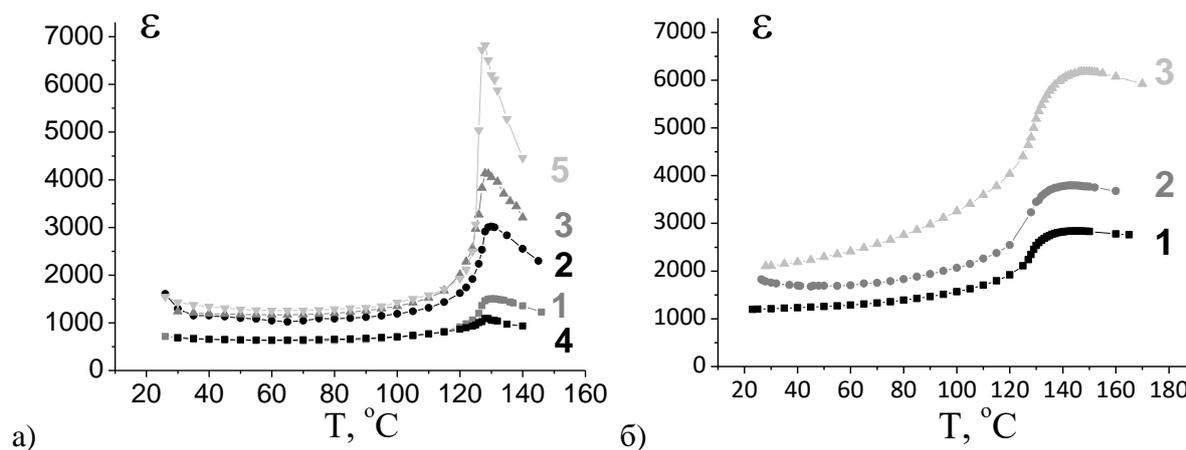


Рис. 1. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости образцов  $\text{BaTiO}_3$  (а) и композита  $\text{BaFe}_{20} - \text{BaTiO}_{380}$  (б), полученных при температурах спекания 1100 (кривая 4), 1150 (кривая 1), 1200 (кривая 2), 1250 (кривая 3) и 1350 (кривая 5) °С

Дальнейшее повышение температуры до 1300 °С показало наличие у данного композита эвтектики. При этом температурная зависимость диэлектрической проницаемости для образцов композита на основе феррита бария – титаната бария с температурой спекания 1250 °С аналогичны зависимости для образцов керамики  $\text{BaTiO}_3$ , спеченных при 1350 °С. Добавление в состав титаната бария феррита бария не только повысило диэлектрическую проницаемость композита, но и привело к размытию сегнетоэлектрического фазового перехода и смещению температуры максимума диэлектрической проницаемости на 10 градусов в сторону высоких температур.

УДК: 544.4.032.7

Шкерина Кристина Николаевна

**ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ АРИЛГАЛОГЕНИДА  
НА ПРОТЕКАНИЕ РЕАКЦИИ СУЗУКИ  
В ПРИСУТСТВИИ КАТАЛИЗАТОРА Pd/MN100**

Руководитель: Л.Ж. Никошвили

Тверской государственный технический университет, г. Тверь  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Реакция кросс-сочетания Сузуки относится к одним из самых известных реакций в области тонкого органического синтеза, позволяющих в одну стадию получать углерод-углеродную связь. Реакция Сузуки дает возможность синтезировать вещества с сильно выраженным фармакологическим действием. Традиционно реакция Сузуки проводится с применением гомогенных комплексов палладия. В качестве альтернативы рассматривают безлигандные каталитические системы. В рамках данной работы исследовано влияние природы арилгалогенида на активность безлигандного палладиевого катализатора в реакции Сузуки.

Каталитическое тестирование образца Pd/MN100-R, предварительно восстановленного в токе водорода, проводилось на примере реакции кросс-сочетания различных арилбромидов (4-броманизола, 4-броманилина, 4-бромтолуола, 4-бромбензальдегида и 4-бромбензола) с фенилбороновой кислотой в присутствии NaOH. Реакция Сузуки проходила на воздухе в предварительно определенных оптимальных условиях: растворитель – смесь этанол/вода (4:1), 60°C, скорость перемешивания 900 об/мин.

Конверсия 4-броманизола, достигаемая за время реакции 60 мин, составила 98,8%, 4-броманилина – 51,6%, 4-бромтолуола – 95,9%, 4-бромбензола – 97,2%, 4-бромбензальдегида – 62,2%. Известно, что ориентанты II-ого рода (-CHO) в пара-положении способны ускорять стадию окислительного присоединения арилгалогенида в каталитическом цикле реакции Сузуки, тогда как ориентанты I-ого рода (-NH<sub>2</sub>, -CH<sub>3</sub>, -OCH<sub>3</sub>), как правило, приводят к более низкой конверсии арилгалогенида. Однако по результатам исследования наилучший результат достигался в случае 4-броманизола, тогда как скорость превращения 4-бромбензальдегида была существенно ниже.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда  
(проект №20-19-00386).*

УДК: 537.226.4

Шустова Ольга Александровна

**ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
КОМПОЗИТНЫХ СЛОИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ  
НА ОСНОВЕ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛАСТИН AlN/AlGaN**

Руководители: А.В. Солнышкин, О.Н. Сергеева

Тверской государственный университет  
Кафедра физики конденсированного состояния

Нитриды алюминия (AlN) и галлия (GaN) характеризуются высокими значениями спонтанной поляризации и пироэлектрических коэффициентов, что позволяет создавать на их основе устройства, которые по своей чувствительности могут превосходить ряд приборов на основе сегнетоэлектриков за счет малых значениях диэлектрической проницаемости и малой величины диэлектрических потерь. Формирование чередующихся слоёв нитрида алюминия и галлия может приводить к особым пьезоэлектрическим и пироэлектрическим свойствам за счет формирования гетеропереходов с системой объёмных зарядов.

Целью настоящей работы являлось исследование монокристаллических слоистых гетероструктур AlN/AlGaN толщиной приблизительно 200 мкм, выращенных методом хлор-гидридной эпитаксии на подложках SiC/Si, которая после выращивания была удалена. Ориентация слоев имела направление [0001], совпадающее со спонтанной поляризацией, что соответствовало максимальному проявлению пироэлектрических свойств.

Для проведения пироэлектрических измерений композитные структуры отделялись от подложки, и на их нижнюю сторону, контактирующую во время роста с подложкой, наносилась платина. На противоположной стороне формировались платиновые контактные электроды размером  $1 \times 1$  мм. Исследования пироэлектрических свойств монокристаллических пластин выполнены динамическим методом с использованием модулированного лазерного излучения с длиной волны 980 нм. Частота модуляции теплового потока варьировалась в пределах  $1 - 10^3$  Гц.

Результаты пироэлектрических измерений свидетельствуют о том, что образование слоев  $Al_xGa_{1-x}N$  может приводить как к увеличению пирокоэффициента композита (при отсутствии промежуточного слоя AlN в начале роста на подложке SiC/Si), так и к его уменьшению (при наличии данного промежуточного слоя) по сравнению с пироэлектрическим коэффициентом чистого AlN. Это различие может достигать двукратного значения.

УДК: 577.1; 543.422.3-74

Шухина Ксения Александровна

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НИТРАТА СЕРЕБРА НА ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ НИЗКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ СИСТЕМ ГЛИЦИНА И ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА

Руководители: С.Д. Хижняк, П.М. Пахомов

Тверской государственный университет  
Кафедра физической химии

Самоорганизация – одна из стратегий создания ансамблей наноструктур – важная часть нанотехнологий. Как было показано ранее [1], системы Gly-ПВС образуют устойчивые агрегаты. Целью данной работы является изучение влияния ионов серебра на процесс самоорганизации. Полученные системы Gly-AgNO<sub>3</sub>-ПВС могут найти применение в медицине, в частности, как плёночные материалы для заживления ран. В связи с бактерицидными свойствами ионов серебра, его нанодисперсии могут служить основой для создания новых классов бактерицидных препаратов, различного рода лекарственных веществ.

Были исследованы двухкомпонентные (AgNO<sub>3</sub>-ПВС) и трёхкомпонентные (Gly-AgNO<sub>3</sub>-ПВС) образцы с различным объёмным соотношением и концентрациями исходных компонентов, из которых методом отлива из раствора в чашке Петри были получены плёнки. Концентрация исходных компонентов: глицина и AgNO<sub>3</sub> – составляла 0,01 М, концентрация ПВС – 5 и 10%. Исследование образцов было проведено с помощью различных физико-химических методов: УФ, ИК-спектроскопии и динамического светорассеяния, вискозиметрии.

Формирование наноагрегатов в образцах было доказано с помощью ДСР. Данные вискозиметрии подтверждают, что Gly, связывая макромолекулы ПВС в качестве гибкого линкера, влияет на пространственную конфигурацию молекул полимера и, как следствие, на структурированность изученных систем в целом. В УФ спектрах систем Gly-AgNO<sub>3</sub>-ПВС была выявлена характеристическая полоса в области 420 нм, что соответствует частоте плазмонного резонанса наночастиц серебра.

*Работа выполнена на оборудовании лаборатории спектроскопии ЦКП ТвГУ.*

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шухина К.А. Процессы самоорганизации в водных растворах глицина, нитрата серебра и поливинилового спирта / Шухина К.А., Хижняк С.Д., Пахомов П.М. // Вестник Тверского государственного университета. Серия: химия - 2019 - №4 (38) – С. 177-187

УДК: 537.226.4

Щеглова Анастасия Игоревна

## ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСИ La НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РЕЛАКСОРА $(\text{Pb}_x\text{La}_{1-x})(\text{Zr}_y\text{Ti}_{1-y})\text{O}_3$

Руководитель: И.Л. Кислова

Тверской государственный университет, г. Тверь  
Кафедра физики конденсированного состояния

В работе проведено исследование влияния концентрации La на диэлектрические свойства керамики PLZT. Состав керамики описывается соотношениями La:Zr:Ti как  $x/y/z$ , где  $x$ ,  $y$ ,  $z$  – концентрации элементов La, Zr и Ti соответственно, ат. %.

Изображения доменной структуры и остаточные петли пьезоэлектрического гистерезиса керамики PLZT  $x/40/60$  получены в режиме силовой микроскопии пьезоэлектрического отклика в контактном режиме на сканирующем зондовом микроскопе MFP-3D SA (Asylum Research, США) с использованием кантилевера марки Asytec-02 (Asylum Research, США).

В образце PLZT 5/40/60 наблюдалась неупорядоченная доменная структура со средним размером доменов до  $2 \mu\text{m}$ , в то время как в керамике PLZT 12/40/60 присутствуют домены как различного типа (лабиринтно-подобные и периодические), так и разного латерального размера от несколько сотен нанометров до  $3 \mu\text{m}$  в диаметре. Кроме того, данные СМП хорошо согласуются с результатами СЭМ, в частности в PLZT 12/40/60 хорошо визуализируются зерна большего размера со «своей» доменной структурой по сравнению с составом PLZT 5/40/60, где нет четких границ зерен. Средние размеры зерен около 2,4 и 6, 6 мкм для образцов PLZT 5/40/60 и PLZT 12/40/60 соответственно.

Диэлектрические свойства образцов исследовались с помощью измерителя иммитанса E7-20 в диапазоне частот от 25 Гц до 1 МГц. Установлено, что величина  $\epsilon$  заметно увеличивается с ростом La. Так, например, на частоте 10 Гц в образце PLZT 5/40/60 величина  $\epsilon$  около 250, а в образце PLZT 12/40/60 порядка 1800, то есть больше почти в 8 раз. В данном случае формирование большего объемного заряда в образцах PLZT 12/40/60 может быть связано с наличием как основной фазы, а именно: ромбоэдрической, так и тетрагональной фаз, а также с наличием «своей» доменной структуры по сравнению с составом PLZT 5/40/60.

УДК: 544.122.2; 544.163.2

Щенухина Алина Сергеевна

**QTAIM ХАРАКТЕРИСТИКИ СЛАБЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ  
МЕТИЛОВОГО КРАСНОГО**

Руководители: Н.П. Русакова, В.В. Туровцев

Тверской Государственный университет  
Кафедра физической химии, кафедра общей физики

Методом V3LYP и в рамках QTAIM [1] были исследованы два изомера метилового красного, с *цис*- (I) и *транс*- (II) положением ароматических колец относительно диазогруппы  $-N=N-$ . Цис-форма подробно рассмотрена в [2, 3]. В I найдено два типа внутримолекулярных слабых взаимодействий (ВМСВ):  $C^{\cdots}H$ ,  $N^{\cdots}O$ , тогда как в II - только  $N^{\cdots}O$ . Взаимодействие  $C^{\cdots}H$  соединяет атомы двух бензольных колец, образуя цикл из шести атомов, а взаимодействие  $N^{\cdots}O$  и в I, и в II возникает между атомами O фрагмента OH карбоксильной и N диазогруппы.

Значение электронной плотности в критических точках (КТ) связываемых путей ( $\rho_b(r)$ )  $C^{\cdots}H$ ,  $N^{\cdots}O$  в рассмотренных структурах составляет 0.012 а.е. (Таблица). Относительно малое значение  $\rho_b(r)$  в КТ связываемых путей  $C^{\cdots}H$ ,  $N^{\cdots}O$  говорит о слабости этих взаимодействий. Положительная величина лапласиана электронной плотности  $\Delta\rho_b(r)$  во всех рассмотренных взаимодействиях показывает наличие переноса электронной плотности через межатомную поверхность и сосредоточение заряда  $q(\Omega)$  в бассейне одного из атомов ВМСВ. Таким образом, имеет место параллельное расширение бассейнов  $\rho(r)$  от связи, вместо перпендикулярного сжатия. Соотношение зарядов атомов, составляющих ВМСВ  $N^{\cdots}O$ , показывает отток электронной плотности в бассейн атома O от N (табл.), а в  $C^{\cdots}H$  от C к H.

Таблица

Характеристики критической точки (3; -1)\* ВМСВ  $C^{\cdots}H$  и  $N^{\cdots}O$  в изомерах I и II: заряды атомов –  $q(\Omega)$  (а.е.), электронная плотность –  $\rho_b(r)$  (а.е.), значения кривизны –  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ , лапласиан –  $\Delta\rho_b(r)$  (а.е.), эллиптичность –  $\epsilon$  и длина связевого пути ( $R_e$ ) (Å).

N <sup>⋯</sup> O								N	O
	$\rho_b(r)$	$\lambda_1$	$\lambda_2$	$\lambda_3$	$\epsilon$	$R_e, \text{Å}$	$\Delta\rho_b(r)$	$q(\Omega)$	$q(\Omega)$
I	0,013	-0,010	-0,009	0,078	0,140	2,71	0,058	-0,389	-1,133
II	0,012	-0,009	-0,008	0,068	0,153	2,80	0,051	-0,448	-1,128
C <sup>⋯</sup> H								C	H
I	0,012	-0,008	-0,004	0,055	0,927	2,74	0,042	0,294	0,023

\*погрешность расчета  $q(\Omega)$  (а.е.),  $\rho_b(r)$ ,  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ ,  $\Delta\rho_b(r)$  и  $\epsilon$  составила 0,001 а.е.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. М.: Мир. 2001. 528 с.
2. Русакова Н.П., Орлов Ю.Д., Туровцев В.В. // Журнал структурной химии 2020. Т. 61. №12. С. 1951-1957.
3. Русакова Н.П., Завьялова А.Г., Туровцев В.В., Третьяков С.А., Федина Ю.А., Орлов Ю.Д. // Вестник ТвГУ. Серия: Химия. 2019. № 4 (38). С. 14-25.

УДК: 66.092.094.25.097

Якубенко Ксения Валерьевна

## ГИДРОДЕСУЛЬФИРОВАНИЕ ДИБЕНЗОТИОФЕНА

Руководитель: А.А. Степачёва, к.х.н., доцент

Тверской государственный технический университет, г. Тверь  
Кафедра биотехнологии, химии и стандартизации

Одной из главных проблем человечества является загрязнение окружающей среды выхлопными газами, а именно содержащимися в них соединениями серы. Однако наличие таких веществ, как сероводород и различные оксиды серы могут привести не только к загрязнению окружающей среды, но и к различным заболеваниям человека. Серьезные последствия для окружающей среды, а также для здоровья человека влекут за собой необходимость проведения процесса очистки нефти от соединений, в состав которых входит сера.

Гидрообессеривание, являющееся каталитическим химическим процессом, широко используемым для удаления серы из топлива, представляет собой реакцию гидролиза, которая требует условий высокой температуры (200 °С – 450 °С) и высокого давления (1,0 - 1,5 МПа) и приводит к расщеплению химической связи C-S. Как традиционный метод сероочистки нефти, гидроочистка может превратить наиболее простые неорганические и органические компоненты серы в нефти в сероводород, однако требуемые условия зависят от уровня необходимой сероочистки.

В данной работе было проведено исследование гидродесульфирования дибензотиофена, выбранного в качестве модельного соединения, с целью удаления из молекулы атома серы. В качестве катализаторов использовались Fe 2%, Ni-Ru и Co-Ru, нанесенный на полимерную матрицу свёрнутого полистирола. Реакция проводилась при следующих условиях: температура –270 °С, начальное давление азота в реакторе – 3,0 МПа, конечное давление в реакторе достигало 7,5-9,5 МПа, растворитель – смесь метанол – гексан, взятые в соотношении 1:1, масса катализатора – 0,1 г. На основе данных газохроматографического анализа было выявлено, что лучшим катализатором для проведения процесса гидродесульфирования дибензотиофена в смеси растворителей метанол - гексан, является Fe (2%) на СПС, поскольку конверсия дибензотиофена составляет 96,53%

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-08-00080*

*Научное издание*

# XXVII КАРГИНСКИЕ ЧТЕНИЯ

ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ  
КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЁНЫХ  
«ФИЗИКА, ХИМИЯ И НОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ»,  
ПОСВЯЩЕННАЯ ГОДУ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ

1-2 апреля 2021 года г. Тверь

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Подписано в печать 14.05.2021. Формат 60x84 <sup>1</sup>/<sub>16</sub>.

Усл. печ. л. 10,64. Тираж 300. Заказ № 116.

Редакционно-издательское управление

Тверского государственного университета

Адрес: 170100, г. Тверь,

Студенческий пер. 12, корпус Б.

Тел. РИУ (4822) 35-60-63.